

特別寄稿

解説：ハバード模型の量子モンテカルロ・アルゴリズム*

東京大学 理学部 羽田野 直道

(1991年4月5日受理)

第1節 初めに

高温超伝導体の理論的解明の中で、ハバード模型や t - J 模型が注目を集めている。これら電子系の研究方法として近年に特に特徴的な流れが、計算機の急速な性能向上によって可能となった大規模な量子モンテカルロ計算である。現在数値実験の方法は各分野で他の方法と十分に比肩しうる成果を上げてきている。計算機はまだまだ発展途上の段階にあり、このような研究が今後ますます重要性を増すものと思われる。数値実験による研究では、計算機の性能だけでなくその方法論も大きな要素となる。特に量子系のモンテカルロ計算では古典系のアルゴリズムを単純に適用するのはほぼ不可能で、そこには一工夫も二工夫も必要とされる。そこで、電子系の量子モンテカルロ計算では実際にどのような方法論が用いられているのか、その経緯を含めて解説を試みた。

第2節で述べる古典系シミュレーションのアルゴリズムが、そのままでは量子系に使えることを第3節で説明し、その解決として第4節で鈴木-トロッター分解を導入、「世界線」の考え方によるモンテカルロの方法を紹介する。しかし、興味のある低温の解明には負符号問題という難関が立ちはだかっている。第5節ではこれを具体的に説明する。負符号問題を緩和するために新たにストラトノヴィッチ-ハバード変換を用いたアルゴリズムが考案された。その基礎となる離散変数型のストラトノヴィッチ-ハバード変換を第6節で示し、なぜそれが負符号問題を緩和するのかを議論する。第7節、第8節は方法論の具体的な式変形に充てられる。低温で起こるもうひとつの問題とその解決を第9節で説明し、更に最近の動向も紹介する。第10節では、最近新たに考案された t - J 模型の量子モンテカルロ・アルゴリズムについても説明する。

第2節 古典系におけるモンテカルロの方法(重みつきサンプリング)

量子系でのモンテカルロ・シミュレーションの方法を述べる前に、まず古典系のモンテカルロ法を復習しよう[1]。非常に多くの自由度を持った系を扱うとき、その自由度をひとつひとつしらみつぶしに調べるのは時間的に不可能に近い、という状況が起こる。そこで、多くの自由度の中から比較的少数のサンプルをある基準で選び出して、それらのサンプルの中から必要な情報の近似値を得ようとするのがモンテカルロ法である。特に統計力学系のモンテカルロ計算では、サンプリングの効率を上げるために重みつきサンプリングが行われる。これを以下で簡単に説明する。

統計力学では、系の各状態 Ψ_i はその状態のエネルギー $\mathcal{H}(\Psi_i)$ に応じて、ボルツマン重み

$$w(\Psi_i) \equiv e^{-\beta \mathcal{H}(\Psi_i)}; \quad \beta \equiv (k_B T)^{-1}, \quad (2.1)$$

に比例する確率で実現される。したがって物理量 Q の平均は、状態 Ψ_i における物理量を $Q(\Psi_i)$ として、

$$\langle Q \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_{\Psi_i} w(\Psi_i) Q(\Psi_i); \quad Z \equiv \sum_{\Psi_j} w(\Psi_j), \quad (2.2)$$

* 本稿は、編集部の方から特にお願ひして執筆していただいた解説記事である。

で求められる。この状態和 $\sum_{\Psi_i}$ を少数の状態 (サンプル) に関する和で代用したい。そのサンプルを選ぶ手続きとして 確率過程 (特にマルコフ過程) を以下のように構成する。最初に、あらゆるサンプル Φ_1 からあらゆるサンプル Φ_2 への フリップ確率 $P_{\text{flip}}(\Phi_1 \rightarrow \Phi_2)$ を定義しておく。そしてステップ数 $n := 1$ から $n := N_{\text{MCS}}$ まで以下の操作 (1)-(3) を繰り返して、適当な初期状態 $\Psi(0)$ から次々にサンプル $\Psi(n)$ を発生させていく。

- (1) 状態 Ψ_{new} を選び、状態 $\Psi(n-1)$ からのフリップ確率 $P_{\text{flip}}(\Psi(n-1) \rightarrow \Psi_{\text{new}})$ を求める。
- (2) 上で求めたフリップ確率と、区間 $[0, 1]$ の一様乱数 R とを比較して、 $R \leq P_{\text{flip}}$ なら第 n ステップの状態 $\Psi(n)$ として Ψ_{new} を採用する。逆に $R > P_{\text{flip}}$ なら第 n ステップの状態 $\Psi(n)$ は前ステップ $\Psi(n-1)$ と同じとする。
- (3) この状態 $\Psi(n)$ における知りたい物理量 $Q(\Psi(n))$ を測定する。

こうして各ステップでの物理量 $Q(\Psi(n))$ が得られる。ここでフリップ確率 P_{flip} が、

エルゴード性 任意の状態から任意の状態へ有限のステップ数で非周期的に到達することができる。

平衡条件 式 (2.1) の重み $w(\Psi_i)$ に対して $\sum_i w(\Psi_i) P_{\text{flip}}(\Psi_i \rightarrow \Psi_j) = w(\Psi_j)$ が成り立つ。

という 2 条件を満たしていれば、上の操作で次々に出てくるサンプルには、各状態 Ψ_i がそれぞれの重み (2.1) に比例する個数だけ混ざってくる、ということが証明される。つまり熱平均 (2.2) における重み w は既に勘定に入っているので、熱平均の近似値は

$$\langle Q \rangle \simeq \sum_{n=1}^{N_{\text{MCS}}} Q(\Psi(n)) / \sum_{n=1}^{N_{\text{MCS}}} 1 = \frac{1}{N_{\text{MCS}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{MCS}}} Q(\Psi(n)) \quad (2.3)$$

で求められる。こうして確率過程で熱平均を代用する方法を重みつきサンプリング、あるいは 動的モンテカルロ法という。上で述べた 2 条件を満たすフリップ確率の決め方には何通りもある。よく使われる熱浴法はその 1 つである。熱浴法では

$$P_{\text{flip}}(\Phi_1 \rightarrow \Psi) = \begin{cases} w(\Phi_1)/[w(\Phi_1) + w(\Phi_2)], & \Psi = \Phi_1 \text{ のとき,} \\ w(\Phi_2)/[w(\Phi_1) + w(\Phi_2)], & \Psi = \Phi_2 \text{ のとき,} \\ 0, & \Psi \neq \Phi_1, \Phi_2 \text{ のとき,} \end{cases} \quad (2.4)$$

と定義する。つまり 1 回のモンテカルロ・ステップ (手順 1 から 3) では、系の状態 Φ_1 が変化しないか、またはある決められた 1 つの状態 Φ_2 へ変化するかのどちらかである (一般には変化先の状態は複数でもよいが、その数は制限しておく)。ボルツマン重み w は必ず正の値を取るので、フリップ確率 (2.4) は 0 と 1 の間の値をとる。

手順 (1) と (2) をイジング・スピン系

$$\mathcal{H} \equiv -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j; \quad s_i = \pm 1, \quad (2.5)$$

で行ってみよう。図 1(a) のような状態 Φ_1 からは、ただ 1 つのイジング・スピン (図 1 の例では格子点 (2,2) のスピン) の向きしか変化できない、とする (図の (b))。2 つの状態のボルツマン重み w は、隣接スピンの状態から

$$w(\Phi_1) = e^{-\beta \mathcal{H}(\Phi_1)} \propto \exp[\beta J(s_{1,2} + s_{3,2} + s_{2,1} + s_{2,3})s_{2,2}] = e^{2\beta J}, \quad w(\Phi_2) \propto e^{-2\beta J}, \quad (2.6)$$

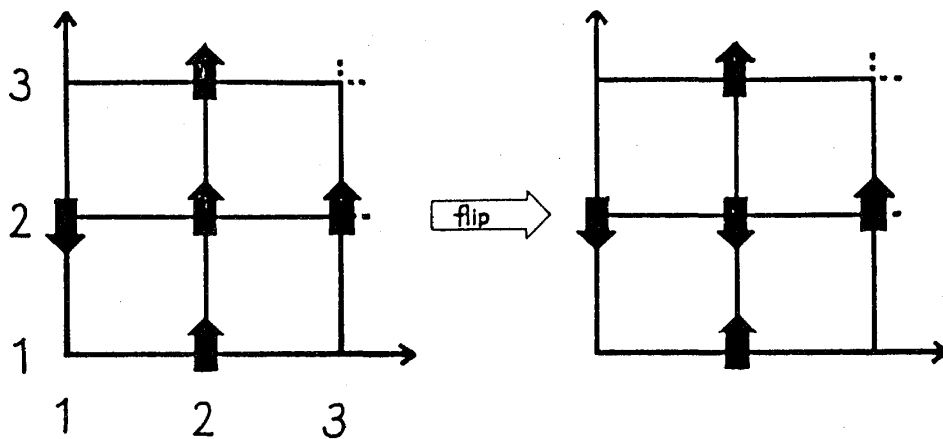


図 1: イジング・スピンのフリップの例.

と計算される。全系のボルツマン重み (2.1) それ自身を求めるのは大変だが、その比

$$X \equiv w(\Phi_2)/w(\Phi_1) = e^{-4\beta J} \quad (2.7)$$

を求めるのは容易である。したがってフリップ確率 (2.4) は

$$P_{\text{flip}}(\Phi_1 \rightarrow \Phi_2) \equiv \frac{w(\Phi_2)}{w(\Phi_1) + w(\Phi_2)} = \frac{X}{1 + X} = \frac{\exp(-4\beta J)}{1 + \exp(-4\beta J)} \quad (2.8)$$

と得られる (手順 (1))。これを乱数 R と比較して $R \leq P_{\text{flip}}(\Phi_1 \rightarrow \Phi_2)$ なら図 1 のスピン $s_{2,2}$ をフリップする (手順 (2))。これで格子点 (2,2) の更新を終えた。順次、別の格子点の更新を行っていき、新しいサンプルが作り出される。

動的モンテカルロ法で重要なのは、問題とする古典系ではボルツマン重みの比 (2.7) が、周囲の格子点の状態から容易に計算できるという点である。しかしそれは古典系ならではの性質であり、次の節で述べるように量子系では重みの比さえ計算困難になってしまう。

第 3 節 ハバード模型

古典力学系では、前節で述べたアルゴリズムに沿って、精力的に研究が続けられている。一方、量子力学系では事情がかなり違ってくる。それを見てみよう。

以下では主に格子上のハバード模型[2]を扱う。ハミルトニアンは $\hat{\mathcal{H}} \equiv \hat{K} + \hat{V}$;

$$\hat{K} \equiv -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}), \quad \hat{V} \equiv \sum_i U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_i \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (3.1)$$

という形をしている。演算子 $\hat{c}^\dagger, \hat{c}$ はそれぞれフェルミオンの生成・消滅演算子を表し、また数演算子を $\hat{n} \equiv \hat{c}^\dagger \hat{c}$ とする。添え字の i, j は格子点を、添え字 σ はフェルミオンのスピンを示す。和記号 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は格子点の組 $\{\langle i,j \rangle\}$ (例えば隣接格子点だが、それに限る必要はない) についての和を表している。つまり上式の $\hat{K}$ は、格子点から格子点へのフェルミオンの移動を表す運動エネルギーの項である。この項は、次のようにフーリエ変換して運動量表示すると理解しやすい。例えば 1 次元格子 (格子点の数 N) で隣接格子点間のみ相互作用があるとする (図 2)。1 次元の運動エネル

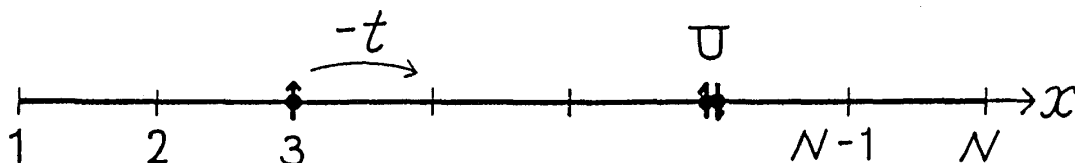


図 2: 1 次元のハバード模型. 相互作用は隣接格子点間のみ.

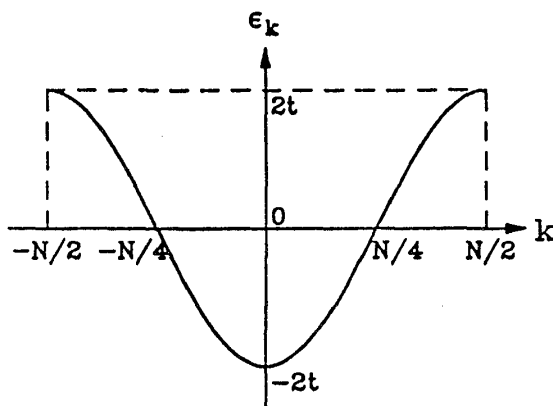


図 3: 運動エネルギーのみを考えたときの分散関係.

ギーは

$$\hat{K}_{1d} \equiv -t \sum_{x=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \left(\hat{c}_{x\sigma}^\dagger \hat{c}_{x+1,\sigma} + \hat{c}_{x+1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{x\sigma} \right) = \sum_{k=1}^N \epsilon_k \hat{n}_{k\sigma}; \quad \epsilon_k \equiv -2t \cos \frac{2\pi}{N} k, \quad (3.2)$$

$$\hat{n}_{k\sigma} \equiv \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma}, \quad \hat{c}_{k\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} kx\right) \hat{c}_{x\sigma}, \quad \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N \exp\left(\frac{2\pi i}{N} kx\right) \hat{c}_{x\sigma}^\dagger, \quad (3.3)$$

と書き直せる. これは「運動量」 k のフェルミオンの運動エネルギーが ϵ_k であることを示している. 分散関係は図 3 のようになっており, タイト・バインディング近似によるバンド構造に外ならない. さて一方, 式 (3.1) の $\hat{V}$ のうち第 1 項の方は, 同じ格子点にスピン $\uparrow$ とスピン $\downarrow$ の 2 個のフェルミオンが入ったときにエネルギーが U 増える, というクーロン力の効果を表している. 第 2 項は化学ポテンシャルの項である.

このようなハミルトニアン (3.1) で定義される系について大分配関数 $Z(\beta, \mu) \equiv \text{Tr}_c \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})$ を計算したい. ただし Tr_c はフェルミオンの自由度についての対角和を表す. ここで現れる指数関数型演算子 $\exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})$ を直接に計算しようとすれば, ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ を適当な基底 $\{|\psi_i\rangle\}$ で表現しておいて, その行列 $\langle \psi_i | \hat{\mathcal{H}} | \psi_j \rangle$ を厳密に対角化しなくてはならない. 固有状態 $\{|\varphi_i\rangle\}$ が

$$\hat{\mathcal{H}}|\varphi_i\rangle = E_i|\varphi_i\rangle, \quad i = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.4)$$

と求まれば, 分配関数は

$$Z = \sum_i \langle \varphi_i | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | \varphi_i \rangle = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (3.5)$$

と得られる. しかし, この対角化 (3.4) は容易なことではない. 以下で見るように, 格子点の数 N に対して, この行列 $\langle \psi_i | \hat{\mathcal{H}} | \psi_j \rangle$ は $4^N \times 4^N$ 行列になってしまうからである.

式(3.1)の $\hat{K}$ は, $2N$ 個の位置固有状態

$$\{|x\sigma\rangle \equiv \hat{c}_{x\sigma}^\dagger |0\rangle \mid x=1,2,\dots,N, \sigma=\uparrow,\downarrow\} \quad (3.6)$$

の間の行列要素 $\langle x\sigma|\hat{K}|x'\sigma'\rangle$ で表現される演算子である. 粒子は各々独立に運動しているので, 多粒子状態の間の行列要素も基本的には状態(3.6)を使って計算できる. このことについては第7節で再び詳しく述べる. 一方, 式(3.1)のポテンシャル $\hat{V}$ は各格子点ごとに独立である. つまり $\hat{V} = \sum_i \hat{V}_i$ としたとき, 格子点 i におけるポテンシャル $\hat{V}_i$ は他の格子点 j のポテンシャル $\hat{V}_j$ と可換 $[\hat{V}_i, \hat{V}_j] = 0$ である. したがって演算子 $\hat{V}$ を表現するには各格子点に対して別々に, スピン $\uparrow$ とスピン $\downarrow$ の粒子がいるか・いないか, という4個の基底

$$\{|0\rangle, |i\uparrow\rangle \equiv \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger |0\rangle, |i\downarrow\rangle \equiv \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger |0\rangle, |i\uparrow\downarrow\rangle \equiv \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger |0\rangle\} \quad (3.7)$$

を用意すれば十分である. いろいろな格子点に粒子が存在しても各格子点ごとに独立に扱えばよいので計算は容易である. ところが式(3.1)の $\hat{K}$ と $\hat{V}$ の和 $\hat{\mathcal{H}}$ を考えようとすると, 問題は複雑になる. 両者が非可換 $[\hat{K}, \hat{V}] \neq 0$ であるために, 一般には $e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \neq e^{-\beta\hat{K}} e^{-\beta\hat{V}}$ である. したがって $\hat{K}$ と $\hat{V}$ を別々に考えることはできず, 行列 $\langle\psi_i|\hat{\mathcal{H}}|\psi_j\rangle$ それ自身を対角化しなくてはならない. その場合には各粒子, 各格子点を独立に扱うわけにはいかない. 計算に際しては例えば, 各格子点にスピン $\uparrow$ とスピン $\downarrow$ のフェルミオンがいるか・いないかの4通りをすべて指定した状態が基底として必要になる. 基底の数は N 個の格子点 $i=1,2,\dots,N$ に対して各4状態, $\{|0\rangle, |1\uparrow\rangle, |1\downarrow\rangle, |1\uparrow\downarrow\rangle\} \otimes \{|0\rangle, |2\uparrow\rangle, |2\downarrow\rangle, |2\uparrow\downarrow\rangle\} \otimes \dots$ の 4^N 個となり, ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ は $4^N \times 4^N$ 行列として扱わなくてはならない. これでは厳密対角化しようとしても, 系の大きさを少し大きくすると, たまに計算機の限界に達してしまう. 前節で述べた古典系のモンテカルロ計算のアルゴリズムをそのまま適用しようとしても, これもうまく行かない. モンテカルロ計算では, ある格子点の状態を変化させるかどうかを判断するために, フリップ確率(2.4)を計算しなければならない. 古典系の場合は式(2.6)-(2.8)で述べたように, その格子点の周辺にある少数の格子点の状態のみを使えばフリップ確率が計算できた. ところがハバード模型(3.1)のように粒子間相互作用がある量子系では, 重み $w(\psi_i) \equiv \langle\psi_i|\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}})|\psi_i\rangle$ を求めるためにいちいち波動関数 $|\psi_i\rangle$, つまり全系の状態を使って, 4^N 次元のヒルベルト空間で計算しなくてはならない. そこには厳密対角化と同じ限界が待ち受けている.

ハミルトニアンに局所的な相互作用しか含まれていなくても, 量子力学的効果のためにある場所での状態の変化は全系に波及する. このため, 量子系での計算は古典系に比べて途端に難しくなる. 大きな系でも計算を可能にするためには, 何らかの方法で行列要素 $\langle\psi_i|\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}})|\psi_i\rangle$ を局所的な因子に分解できるようにしなければならない. そこで使われるのが次節で述べる鈴木-トロッター分解である.

第4節 量子モンテカルロ法と「世界線」法

ここでは鈴木-トロッター分解を使って量子系を古典系にやきなおす方法を示す. また, モンテカルロ・シミュレーションを行う方法の例として「世界線」法を紹介する[3,4].

4.1 鈴木-トロッター分解

そのままでは対角化しにくい演算子 $\hat{\mathcal{H}}$ が, 対角化しやすいような演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ の和 $\hat{\mathcal{H}} = \hat{A} + \hat{B}$ の形に書けるとしよう. 鈴木によって厳密に示された鈴木-トロッター分解[5]を用いると, 求めた

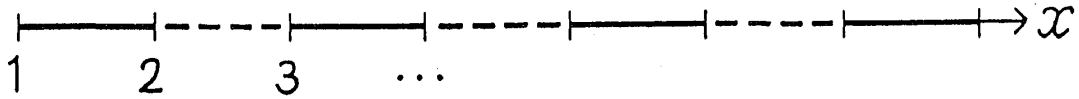


図 4: 「世界線」法における 1 次元ハバード模型の分解 $\hat{\mathcal{H}}_1$ (実線) と $\hat{\mathcal{H}}_2$ (破線)。

い指数関数型の演算子 $\exp(x\hat{\mathcal{H}})$ が

$$e^{x\hat{\mathcal{H}}} = e^{x(\hat{A}+\hat{B})} = \left(e^{x\hat{A}/L} e^{x\hat{B}/L} \right)^L + O(x^2/L) \quad (4.1)$$

の形に書き直せる。演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ をうまく選んで式 (4.1) の右辺が計算しやすい形にできれば、極限 $L \rightarrow \infty$ を外挿して左辺が求められることがわかる。

ハバード模型のハミルトニアン (3.1) は、どのように分解すると便利だろうか。最も単純に考えると、運動エネルギー $\hat{K}$ と位置エネルギー $\hat{V}$ に分解することを思いつく。これを計算するためのヒルベルト空間の基底としては運動量固有状態と位置固有状態が考えられる。まず前者では $\exp(-\Delta\tau\hat{K})$ の方は対角化されているが、逆に $\exp(-\Delta\tau\hat{V})$ を計算するには非常に不利である。ポテンシャル $\hat{V}$ においては 2 粒子が相互作用するので、1 粒子状態の基底のみでは表現しきれないからである。一方、位置固有状態を使うと演算子 $\exp(-\Delta\tau\hat{V})$ は状態 (3.7) を使った 4×4 行列でよい。しかし演算子 $\exp(-\Delta\tau\hat{K})$ の方は状態 (3.6) を使った $N \times N$ 行列となり、多少不利である。

そこで次のような分解を使おう [6-8]。簡単のために再び 1 次元系で考える。ハミルトニアンを

$$\hat{\mathcal{H}}_{1d} \equiv \sum_{x=1}^N \hat{\mathcal{H}}_{x,x+1}; \quad \hat{\mathcal{H}}_{x,x+1} \equiv \hat{K}_{x,x+1} + \frac{1}{2} (\hat{V}_x + \hat{V}_{x+1}), \quad (4.2)$$

$$\hat{K}_{x,x+1} \equiv -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (\hat{c}_{x\sigma}^\dagger \hat{c}_{x+1,\sigma} + \hat{c}_{x+1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{x\sigma}), \quad \hat{V}_x \equiv U \hat{n}_{x\uparrow} \hat{n}_{x\downarrow} - \mu \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{n}_{x\sigma}, \quad (4.3)$$

のように書いておく。これを $\hat{\mathcal{H}}_{1d} = \hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2$;

$$\hat{\mathcal{H}}_1 \equiv \sum_{x=\text{odd}} \hat{\mathcal{H}}_{x,x+1}, \quad \hat{\mathcal{H}}_2 \equiv \sum_{x=\text{even}} \hat{\mathcal{H}}_{x,x+1}, \quad (4.4)$$

と分けて (図 4) 鈴木-トロッター分解 (4.1) を適用する。つまり相互作用ボンドを交互に $\hat{\mathcal{H}}_1$ と $\hat{\mathcal{H}}_2$ に割り振る分割である。近似分配関数はいくつもの完全系 $\{|\psi_i\rangle\}$ をはさんで [6]

$$\begin{aligned} Z_L &\equiv \text{Tr}_c \left(e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_1} e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_2} \right)^L = \sum_i \langle \psi_i | \left(e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_1} e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_2} \right)^L | \psi_i \rangle \\ &= \sum_i \sum_j \sum_k \cdots \sum_m {}_1\langle \psi_i | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_1} | \psi_j \rangle {}_2\langle \psi_j | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_2} | \psi_k \rangle {}_3\langle \psi_k | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_1} | \psi_l \rangle {}_4\langle \psi_l | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_2} | \psi_m \rangle \cdots {}_{2L}\langle \psi_m | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_1} | \psi_i \rangle {}_1\langle \psi_i | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_2} | \psi_i \rangle \\ &\equiv \sum_{\Psi} w(\Psi) \end{aligned} \quad (4.5)$$

と書ける。部分ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_1$ の各項 $\hat{\mathcal{H}}_{x,x+1}$ は互いに可換 $[\hat{\mathcal{H}}_{x,x+1}, \hat{\mathcal{H}}_{y,y+1}] = 0$ である。したがって、ボンドの両端の 2 つの格子点の状態を指定する基底をボンドごとに独立に用意すればよい。例えば $\hat{\mathcal{H}}_{1,2}$ を表現するためには $\{|0\rangle, |1\uparrow\rangle, |1\downarrow\rangle, |1\uparrow\downarrow\rangle\} \otimes \{|0\rangle, |2\uparrow\rangle, |2\downarrow\rangle, |2\uparrow\downarrow\rangle\}$ の 16 個の状態を用意する。この基底によってとなり合う格子点をつなぐボンドの相互作用演算子 $\hat{\mathcal{H}}_{1,2}$ の表

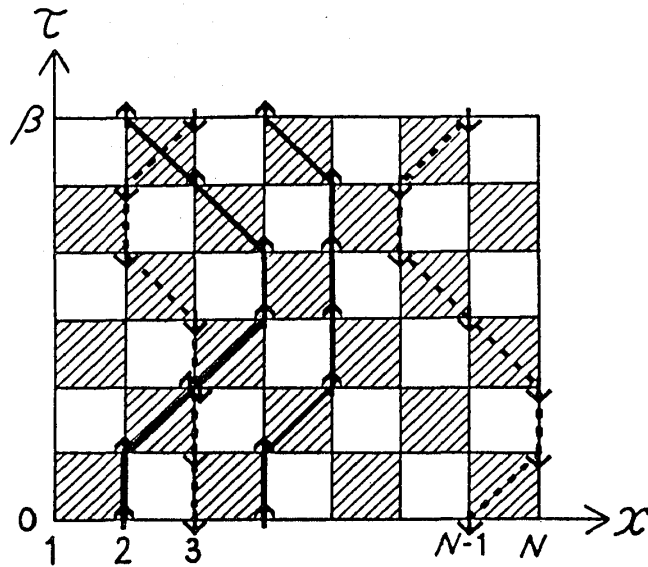


図 5: 1 次元ハバード模型のチェッカー・ボード分解と各格子点のとり状態の例.

現行列は最大でも 4×4 の行列にブロック対角化されているので、完全に対角化して指数関数型演算子 $\exp(-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_{1,2})$ の行列要素を求めるのは容易である。いくつかの格子点に粒子が存在するような状態の間の行列要素は、局所的に分解して計算できる。例えば次のような行列要素は

$$\langle 1 \uparrow, 2 \downarrow, 3 \uparrow | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_1} | 2 \uparrow, 4 \uparrow \rangle = \langle 1 \uparrow, 2 \downarrow | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_{1,2}} | 2 \uparrow \downarrow \rangle \times \langle 3 \uparrow | e^{-\Delta\tau\hat{\mathcal{H}}_{3,4}} | 4 \uparrow \rangle \quad (4.6)$$

となる。したがって実際の計算はボンドごとに別々に 16×16 行列で行える。こうして式 (4.5) の右辺は $4^N \times 4^N$ 行列を使わずに求めることができる。

式 (4.5) は図 5 のような系がとる様々な状態 $\{|\psi_i\rangle_1, |\psi_j\rangle_2, \dots\}$ に関する状態和と読み換えられる。各格子点が 4 つの状態 $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ のいずれかを取り、全体では例えば図 5 のようになる。つまりこれは古典系である。式 (4.6) のように分解して計算できるということは、図 5 の斜線部の隅にある 4 つの格子点が相互作用していることを意味している。この図から、式 (4.4)・(4.5) の形の分解はチェッカー・ボード分解と呼ばれる [8]。同じようにして、一般に d 次元の量子系は $(d+1)$ 次元の古典系に書き換えることができる [9]。古典系に書き直す際に新たに加わった次元 τ を Trotter 方向と呼び、指数 L のことを Trotter 数という。

4.2 「世界線」による解釈

さて、以下で上の古典系をモンテカルロ計算する「世界線」法について述べよう。それには式 (4.5) を次のように解釈するとわかりやすい。

絶対 0 度の量子力学系の時間発展は、シュレーディンガー方程式 $i(\partial/\partial t)|\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\psi(t)\rangle$ を形式的に解いて、

$$|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{\mathcal{H}}}|\psi_i(0)\rangle \quad (4.7)$$

で記述される。ここでも指数関数型の演算子が現れ、平衡系の統計力学 (3.5) と量子力学 (4.7) の間には「 β (温度) $\leftrightarrow it$ (虚時間)」という対応があることがわかる。行列要素 $\langle\psi_i|\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}})|\psi_j\rangle$ は状態 $|\psi_j\rangle$ から状態 $|\psi_i\rangle$ へのグリーン関数 $\langle\psi_i|\exp(-it\hat{\mathcal{H}})|\psi_j\rangle$ に対応づけられる。式 (4.5) で

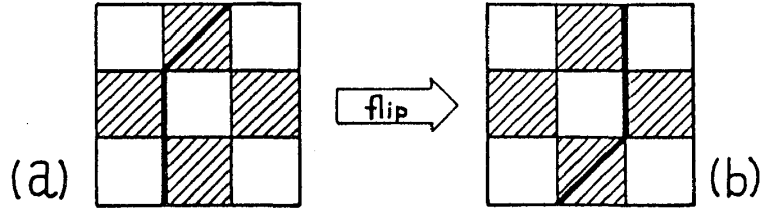


図 6: 世界線のフリップの 1 例.

$\Delta\tau \rightarrow i\Delta t$ と置き換えれば, 時間 $(0, t)$ を微小時間 $\Delta t \equiv t/L$ に細分して経路積分を行っていることになる. トロッター方向がここでは時間軸に外ならないことがわかる.

式 (4.5) の行列要素 $\langle \psi_j(\Delta t/2) | \exp(-i\Delta t \hat{\mathcal{H}}_1) | \psi_i(0) \rangle$ は, 初期状態 $|\psi_i(0)\rangle$ (図 5 の第 1 層の状態) から時刻 $\Delta t/2$ の状態 $|\psi_j(\Delta t/2)\rangle$ (図 5 の第 2 層の状態) への, 微小時間のグリーン関数である. この立場から式 (4.6) のような行列要素を見直すと, 第 1 層と第 2 層で粒子が (スピンの区別も込めて) 同数である状態の間にしか, 行列要素が存在しないことがわかる. これはグリーン関数によってフェルミオンが時刻 $0 \rightarrow \Delta t/2$ の間に伝搬していく, と考えれば当然の結果といえる. 図 5 は 1 次元量子系の「時空」(1+1 次元) 中の太線で示されたフェルミオンの伝搬を表していると解釈できる. この太線はフェルミオンが時刻 0 から t まで時空を伝搬していく「世界線」である [8]. このように考えると, 式 (4.5) における行列要素の積の 1 つ 1 つが, 時空中の世界線配置と 1 対 1 対応していることがわかる (ただし $\tau = 0$ と $\tau = \beta$ では状態が同じでなくてはならないので, トロッター方向には周期的境界条件が必要である). そして式 (4.5) の和 $\sum_{\Psi}$ は, それぞれの配置 Ψ に対応するボルツマン重み $w(\Psi)$ を足し上げる作業, ということになる. この系をモンテカルロ計算するには重み w に従ってフリップ確率 (2.4) を計算して, 様々な「世界線」配置 Ψ を重みつきサンプリングすればよい. 例えば図 6 のフリップでの新旧の世界線配置の重みを式 (4.6) のように分解すれば, 両者の比 $X \equiv w(\Phi_2)/w(\Phi_1)$ は簡単に計算できて, 熱浴法によるフリップ確率 (2.4) は,

$$P_{\text{flip}}(\Phi_1 \rightarrow \Phi_2) \equiv w(\Phi_2)/[w(\Phi_1) + w(\Phi_2)] = X/(1 + X) \quad (4.8)$$

と求められる. このフリップ確率と乱数を比較して図 6 のフリップを行うかどうかを判断する.

この系でのある物理量 $\langle Q \rangle$ を知りたいとする. 例えば, この物理量が $[\hat{Q}, \hat{\mathcal{H}}_1] = 0$ となるような演算子 $\hat{Q}$ の期待値とすれば [8]

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &\equiv \text{Tr}_c \hat{Q} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) / \text{Tr}_c \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) \simeq \frac{1}{Z_L} \sum_i \langle \psi_i | \hat{Q} \left(e^{-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_1} e^{-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_2} \right)^L | \psi_i \rangle \\ &= \frac{1}{Z_L} \sum_i \sum_j \sum_k \cdots \sum_m {}_1\langle \psi_i | \hat{Q} e^{-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_1} | \psi_j \rangle_2 \times {}_2\langle \psi_j | e^{-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_2} | \psi_k \rangle_3 \cdots \\ &\stackrel{(4.5)}{=} \frac{1}{Z_L} \sum_{\Psi} w(\Psi) \frac{{}_1\langle \psi_i | \hat{Q} e^{-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_1} | \psi_j \rangle_2}{{}_1\langle \psi_i | e^{-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_1} | \psi_j \rangle_2} \equiv \langle \langle \tilde{Q} \rangle \rangle \simeq \frac{1}{N_{\text{MCS}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{MCS}}} \tilde{Q}(\Psi(n)) \end{aligned} \quad (4.9)$$

と変形される. ただし $\tilde{Q}(\Psi) \equiv {}_1\langle \psi_i | \hat{Q} e^{-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_1} | \psi_j \rangle_2 / {}_1\langle \psi_i | e^{-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_1} | \psi_j \rangle_2$ とし (これは c -数であることを注意), 記号 $\langle \langle \cdots \rangle \rangle$ は書き換えられた古典系 (4.5) に関する熱平均を示す. 各モンテカルロ・ステップでそのときの状態 $\Psi(n)$ に対応する量 $\tilde{Q}(\Psi(n))$ を測定すればよいことがわかる.

ここで述べた「世界線」法のモンテカルロ・アルゴリズムではフリップ確率 P_{flip} を局所的な情報から計算できる, という点が重要である. すなわち古典系の場合 (2.6)-(2.8) と同じく, ある格子点

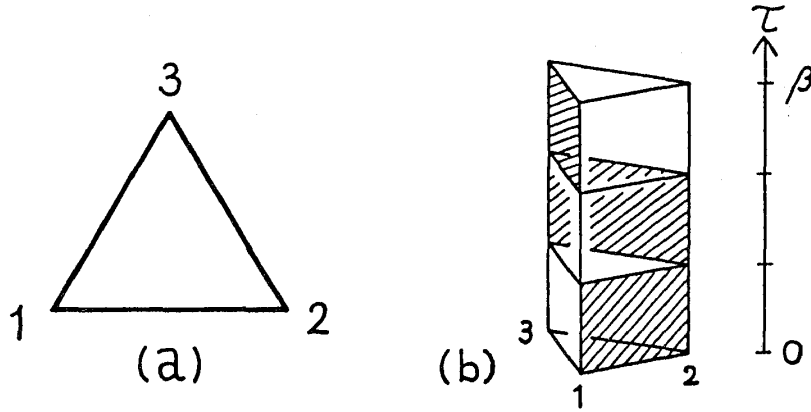


図 7: (a) 3 角形上のフェルミオン系と, (b) その鈴木-トロッター分解 ($L = 1$) .

の状態の更新は, その周辺の格子点の状態だけがわかれば式 (4.8) のように行える. シミュレーションの 1 モンテカルロ・ステップは「時空」の各格子点についてフリップ確率 P_{flip} を求める作業である. したがってそれに要するコンピュータの CPU 時間は NL に比例するだけであり, 厳密対角化の方法より系の大きさを大きくしやすい. 後はできるだけ大きいトロッター数 L までのデータを得て, 極限 $L \rightarrow \infty$ を外挿すればよい. こうして 1980 年代の初めにかけて, この「世界線」法を使った 1 次元電子系のモンテカルロ・シミュレーションが行われた [7,8,10].

しかし 2 次元以上になると, そこには次節で述べる負符号問題が待ち受けていた.

第 5 節 負符号問題

古典系のボルツマン重み (2.6) は, 当然ながら正の量である. しかし, 量子系を鈴木-トロッター分解によって読み換えた「古典系」では, 必ずしもそうなるとは限らない. 以下でその様子を調べてみよう.

5.1 負のボルツマン重み

計算を簡単にするため, 図 7 (a) の 3 角形上でのフェルミオンの運動を考える. フェルミオンのスピンは無視し, クーロン・ポテンシャルも 0 にする. つまりハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{free}} = -t \left[(\hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1 + \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2) + (\hat{c}_3^\dagger \hat{c}_2 + \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_3) + (\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_3 + \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_1) \right] \quad (5.1)$$

である. このハミルトニアンは 2^3 個の基底

$$\left\{ \begin{array}{l} |0\rangle, \quad |1\rangle \equiv \hat{c}_1^\dagger |0\rangle, \quad |2\rangle \equiv \hat{c}_2^\dagger |0\rangle, \quad |3\rangle \equiv \hat{c}_3^\dagger |0\rangle, \\ |2,3\rangle \equiv \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_3^\dagger |0\rangle, \quad |3,1\rangle \equiv \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_1^\dagger |0\rangle, \quad |1,2\rangle \equiv \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger |0\rangle, \quad |1,2,3\rangle \equiv \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_3^\dagger |0\rangle \end{array} \right\} \quad (5.2)$$

で表現される. 式 (5.1) を対角化して指数関数型演算子 $\exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{free}})$ の表現行列を求めるのは容易であるが, ここでは負符号問題を調べるためにわざと

$$Z \equiv \sum_i \langle \psi_i | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{free}}} | \psi_i \rangle \simeq Z_1 \equiv \sum_{\Psi} w(\Psi), \quad (5.3)$$

$$w(\Psi) \equiv \langle \psi_i | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{1,2}} | \psi_j \rangle \langle \psi_j | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{2,3}} | \psi_k \rangle \langle \psi_k | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{3,1}} | \psi_i \rangle, \quad (5.4)$$

と分解して考えることにする (図 7 (b)). 部分ハミルトニアンは $\hat{\mathcal{H}}_{i,j} \equiv -t(\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i)$ として, トロッター数は $L=1$ にとっている.

以下で問題にしたいのは 2 粒子状態に対する演算である. そこで, 各指数関数型演算子から 2 粒子状態 $\{|2, 3\rangle, |3, 1\rangle, |1, 2\rangle\}$ に関するブロックを書き出してみると,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \langle 2, 3| \\ \langle 3, 1| \\ \langle 1, 2| \end{pmatrix} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{1,2}} \begin{pmatrix} |2, 3\rangle & |3, 1\rangle & |1, 2\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} c & -s & \\ -s & c & \\ & & 1 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \langle 2, 3| \\ \langle 3, 1| \\ \langle 1, 2| \end{pmatrix} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{2,3}} \begin{pmatrix} |2, 3\rangle & |3, 1\rangle & |1, 2\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & & \\ & c & -s \\ & -s & c \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \langle 2, 3| \\ \langle 3, 1| \\ \langle 1, 2| \end{pmatrix} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{3,1}} \begin{pmatrix} |2, 3\rangle & |3, 1\rangle & |1, 2\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} c & & -s \\ & 1 & \\ -s & & c \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$c \equiv \cosh \beta t, \quad s \equiv \sinh \beta t, \quad (5.6)$$

となっている. 式 (5.3) の右辺の和 $\sum_\Psi$ は, この 3 つの行列 (5.5) をかけ算して $(\sum_j \sum_k)$, さらに対角和をとる $(\sum_i)$ ことを意味している.

一方, これを「世界線」法に従って解釈すると, 4.2 節で述べたように例えば要素の積

$$\langle 1, 2 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{1,2}} | 1, 2 \rangle \langle 1, 2 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{2,3}} | 1, 2 \rangle \langle 1, 2 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{3,1}} | 1, 2 \rangle = c^2 \quad (5.7)$$

は, 図 8(d) のような世界線配置に対応している. 同じ重みの配置が全部で 3 つある. 別の積

$$\langle 2, 3 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{1,2}} | 3, 1 \rangle \langle 3, 1 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{2,3}} | 1, 2 \rangle \langle 1, 2 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{3,1}} | 2, 3 \rangle = -s^3 \quad (5.8)$$

は, 図 8(e) に対応している. 粒子数の異なる状態も含めて全部で 10 種類の世界線配置がある (図 8) トロッター方向には周期的境界条件が必要なので, これ以外の配置はない. それぞれの重みは

$$w(\Psi) = 1, \quad c^2, c^2, c^2, \quad s^3, \quad c^2, c^2, c^2, \quad -s^3, \quad 1, \quad (5.9)$$

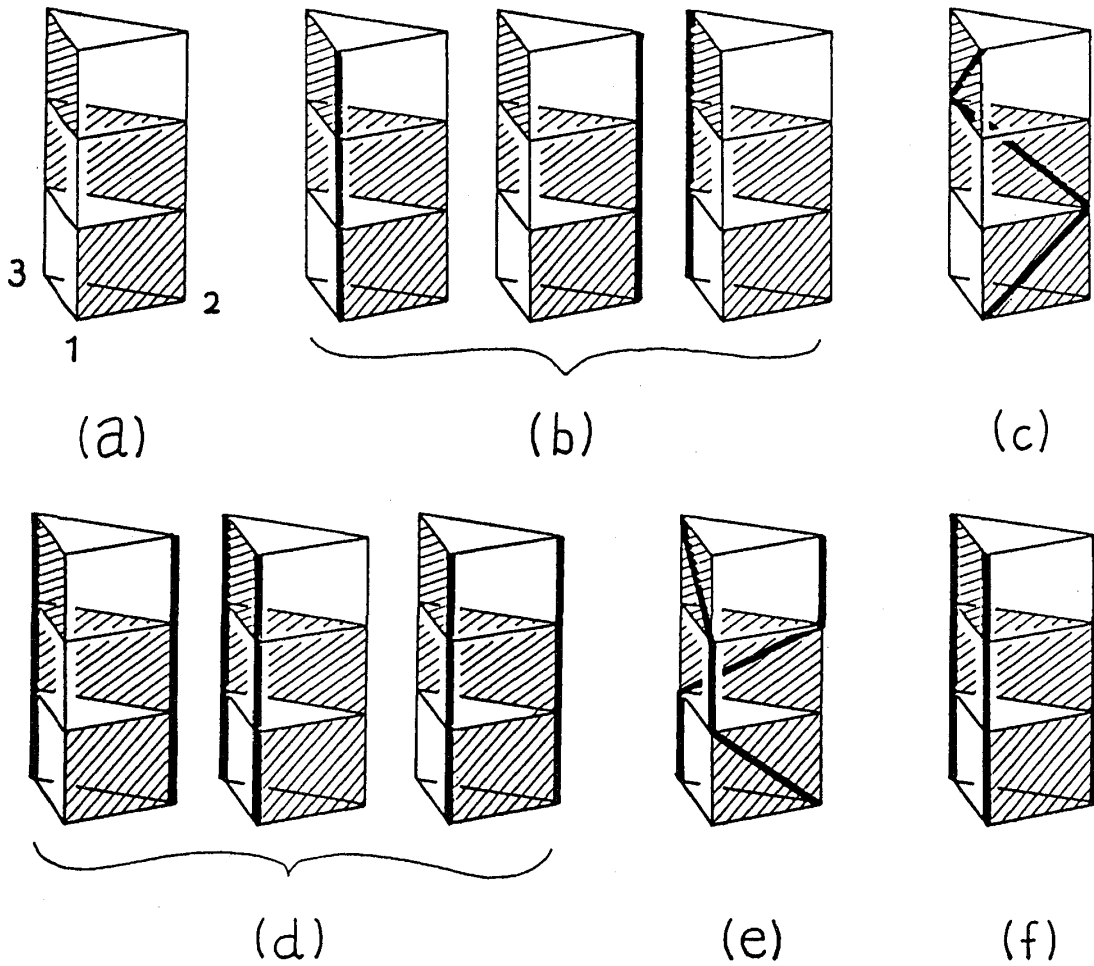
である. 式 (4.8) のようにして求めたフリップ確率に従ってこれらの配置を発生させれば, 正しいモンテカルロ平均が得られるはずである.

ところがここで, 式 (5.8) に対応する世界線配置が問題となる. 古典系のボルツマン重みは必ず正の値をとるので, フリップ確率 (2.4) は 0 と 1 の間の値をとった. しかし, 式 (5.8) のボルツマン重みは負である. これはトロッター方向 $\tau=0$ から $\tau=\beta$ の間に, 2 つのフェルミオンがその位置を入れ換えたことによる. 重みが負になったのでは, フリップ確率 (2.4) が負になったり, あるいは 1 より大きくなる, ということが起こり得る. そうなると, 動的モンテカルロ計算のそもそもの基礎である確率過程が無意味となる.

5.2 重みの絶対値

そこで, 以下のようなテクニックでこれを回避する. 重み (5.9) による近似分配関数 Z_1 の代わりに, 次のような分配関数

$$Z'_1 \equiv \sum_\Psi w'(\Psi), \quad (5.10)$$


 図 8: トロッター数 $L = 1$ の場合に考えられるすべての世界線配置.

$$w'(\Psi) \equiv |w(\Psi)| = 1, \quad c^2, c^2, c^2, \quad s^3, \quad c^2, c^2, c^2, \quad s^3, \quad 1, \quad (5.11)$$

で定義される「系」*をシミュレーションすることにする。すなわち、この「系」のボルツマン重み w' を用いてフリップ確率 (2.4) を計算するのである。重み w' は必ず正なので、フリップ確率 P_{flip} は再び意味をもつ。

本当に知りたいのは Z_1 の系なので、式 (5.10) の「系」 Z'_1 から Z_1 が再生できなくてはならない。これは次のようにすればよい。各状態のボルツマン重み w の符号を

$$S(\Psi) \equiv \text{sign}(w(\Psi)) = \pm 1 \quad (5.12)$$

とする（今の場合は、図 8(e) の世界線配置に対してのみ $S = -1$ となる）。重み w と w' は

$$w(\Psi) = S(\Psi)w'(\Psi) \quad (5.13)$$

という関係にあるから、分配関数 Z_1 と Z'_1 との比は

$$\frac{Z_1}{Z'_1} = \frac{\sum_{\Psi} w'(\Psi) S(\Psi)}{\sum_{\Psi} w'(\Psi)} = \langle \langle S \rangle \rangle' \simeq \frac{1}{N_{\text{MCS}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{MCS}}} S(\Psi(n)) \quad (5.14)$$

*この例では「系」 Z'_L が $L \rightarrow \infty$ でハードコア・ボゾン系になることがわかる [27] が、一般の場合に「系」が実際の物理系に対応しているかは明らかではない。

である。ここで記号 $\langle\langle \dots \rangle\rangle'$ は式 (5.10) の「系」における熱平均、和記号 $\sum'$ はその「系」のシミュレーションにおけるモンテカルロ平均を表す。つまり式 (5.14) は、各モンテカルロ・ステップで符号 (5.12) を測定すれば評価できる。また、式 (4.9) のような物理量は

$$\langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle = \frac{\sum_{\Psi} w(\Psi) \tilde{Q}(\Psi)}{\sum_{\Psi} w(\Psi)} = \frac{\sum_{\Psi} w'(\Psi) S(\Psi) \tilde{Q}(\Psi)}{\sum_{\Psi} w'(\Psi) S(\Psi)} = \frac{\sum w' S \tilde{Q}}{\sum w'} \bigg/ \frac{\sum w' S}{\sum w'} = \frac{\langle\langle S \tilde{Q} \rangle\rangle'}{\langle\langle S \rangle\rangle'} \quad (5.15)$$

と変形されるので、各ステップで $S \tilde{Q}$ という量を測定して、式 (5.14) で補正しておけばよいことがわかる。このようにして Z_1' の「系」のシミュレーションから Z_1 の系の情報が再現できる。

5.3 低温での困難

これで困難は回避されたかのように見える。しかし、式 (5.14) の値 $\langle\langle S \rangle\rangle'$ をモンテカルロ計算で評価する際に、特に低温で深刻な問題が生じる。低温 $\beta \rightarrow \infty$ に近づくにつれ式 (5.6) が $c, s \rightarrow \exp(\beta t)/2$ となるので、式 (5.9) のうち重み $w' \simeq \exp(3\beta t)/8$ の 2 つの配置 (図 8 の (c) と (e)) が、低温のシミュレーションで出現する状態のうちの大多数を占めるといってよい。例えば、

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	...
$\Psi(n)$	(c)	(c)	(e)	(e)	(e)	(c)	(b)	(e)	(d)	(c)	...
$S(\Psi(n))$	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1	...

(5.16)

などとなる (状態 $\Psi(n)$ のアルファベットは図 8 の番号)。ところが、この 2 つの配置 (c) と (e) に対する符号 (5.12) はそれぞれ +1 と -1 である。つまり式 (5.14) をモンテカルロ計算する際、低温での測定値 $S(\Psi(n))$ は +1 と -1 がほぼ同数となり、その平均は 0 に近い値をとるようになる (もちろん重み $w' \simeq \exp(2\beta t)/4$ の配置も僅かながら存在するので、本当の平均値は正である)。一方その測定誤差は 1 のオーダーに残る。つまり求めたい値それ自身より誤差の方が大きくなってしまふ。例えばシミュレーション (5.16) の結果をそのまま統計解析すると $\langle\langle S \rangle\rangle'_{\text{MCS}} = 0.2 \pm 0.98$ である。こうなると物理量 (5.15) の右辺の評価はほぼ不可能である。低温でのこの困難を量子モンテカルロ法の負符号問題と呼ぶ。

さて、負符号問題にはどのように対処すればよいだろうか。そもそも図 8 に示されている 10 個の世界線配置の重み (5.9) は、足し上げてしまうと $Z_1 = 1 + 3c^2 + s^3 + 3c^2 - s^3 + 1 = 2 + 6c^2$ となり、問題となっていた図 8(c) と (e) の 2 つの状態のボルツマン重み s^3 と $-s^3$ は打ち消しあってしまう。低温でのシミュレーションで出現する世界線配置の大多数を占めるこの 2 つの状態は、もともと不要の存在なのである [11]。ところが「世界線」法では、足せば 0 になってしまうこの 2 つをわざわざ別々の状態として扱うために、問題が深刻化したと見ることができる (ポテンシャルも考慮に入れると上の議論のように単純に打ち消しあうわけではないが、 Trotter 数 $L \rightarrow \infty$ の極限では同じ状況である)。そこで対策としては、シミュレーションのアルゴリズムに乗せる以前の段階で状態和 ($\sum_{\Psi}$) の操作をできるだけ済ませておきたい。高いオーダーのボルツマン重み (例えばここでは s^3 と $-s^3$) をあらかじめキャンセルさせてしまい、いざモンテカルロ計算する段階では、発生する状態の重みのオーダーを低く抑えるのである。こうしておけば、モンテカルロ・ステップが不要な状態で占拠されてしまふ、といった状況を防ぐことができる。

第 4 節で述べた「世界線」法は、全空間に広がっているエネルギー $\hat{K}$ を小さい空間に分解することによって行列を扱いやすくした。しかし振り返ってみると、状態和を阻んでいたのはポテンシャルの項 $\hat{V}$ である。運動エネルギー $\hat{K}$ の項は粒子ごとに独立に扱えるが、ポテンシャル (3.1) において

粒子が相互作用しているために独立性が失われてしまった。そこで以下で述べるアルゴリズムでは、粒子間にまたがる相互作用 $\hat{V}$ の方を粒子ごとに分解することによって行列を扱いやすくし、フェルミオンを消去しやすくする。その分解操作がストラトノヴィッチ・ハバード変換である。

第 6 節 離散変数型ストラトノヴィッチ・ハバード変換

以下の 3 節で、ストラトノヴィッチ・ハバード変換を用いた量子モンテカルロのアルゴリズムについて説明する [4, 12, 13]。新しい補助場を導入して、ハバード模型を形式的に粒子間相互作用のない系に変形してしまい、負符号問題の原因となったフェルミオンの自由度は完全に消去する。後には補助場の自由度が残っているので、それについてはモンテカルロ計算するというのがその粗筋である [16]。この節ではその出発点となるストラトノヴィッチ・ハバード変換を示し、それによって量子系のボルツマン重みがどのように書き換えられるかを述べる。

6.1 補助場の導入

計算を具体的にするために再び図 7 (b) の 3 角形上で、ただし今度はちゃんとスピンも考慮に入れてハバード模型を考えよう。ハミルトニアンは $\hat{\mathcal{H}} \equiv \hat{K} + \hat{V}$;

$$\hat{K} \equiv -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}), \quad \hat{V} \equiv \sum_{i=1}^3 U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i=1}^3 \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (6.1)$$

である。和 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は $\langle i,j \rangle = \langle 1,2 \rangle, \langle 2,3 \rangle, \langle 3,1 \rangle$ についてとる。

「世界線」法で用いた鈴木-トロッター分解 (4.5) は、ハミルトニアンを実空間で分解するものであった。以下では、最初にしりぞけた分解

$$e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} = \left(e^{-\Delta\tau \hat{K}} e^{-\Delta\tau \hat{V}} \right)^L + O(\beta^2/L); \quad \Delta\tau \equiv \beta/L, \quad (6.2)$$

に戻って考えよう。この分解が不利であると考えられたのは、ポテンシャル項 $\exp(-\Delta\tau \hat{V})$ の粒子間相互作用のために行列が扱いにくいからであった。そこでストラトノヴィッチ・ハバード変換が必要になる。

最初に Stratonovich が導入したストラトノヴィッチ・ハバード変換 (SH 変換) [14] は補助場が連続的な値をとる形だったので、シミュレーションのアルゴリズムには乗りにくかった。Hirsch は、相互作用 $\hat{V}$ に現れるフェルミオン数が $n = 0, 1$ という離散的な値しかとらないことに着目して、離散変数型の SH 変換 [15] を導いた。これは、各格子点 i に対して補助場 s_i を導入して、

$$\begin{aligned} \exp(-\Delta\tau U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}) &= \frac{1}{2} \sum_{s_i=\pm 1} \exp \left[2as_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) - \frac{\Delta\tau U}{2} (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{s_i=\pm 1} \exp \left[\left(2as_i - \frac{U\Delta\tau}{2} \right) \hat{n}_{i\uparrow} \right] \cdot \exp \left[\left(-2as_i - \frac{U\Delta\tau}{2} \right) \hat{n}_{i\downarrow} \right] \end{aligned} \quad (6.3)$$

とする変換である。ここで、補助場 s_i は格子点ごとに独立に ± 1 の値を取り、パラメータ a は

$$\cosh 2a = e^{U\Delta\tau/2} \quad (6.4)$$

と定義されている (引力 $U < 0$ の模型では別の変換を使う)。粒子数固有状態を基底にとって式 (6.3) の両辺を見比べると、

式 (6.3) の左辺			式 (6.3) の右辺		
	$\hat{n}_{i\uparrow}$			$\hat{n}_{i\uparrow}$	
	0	1		0	1
$\hat{n}_{i\downarrow}$	0	1	$\hat{n}_{i\downarrow}$	0	$\cosh 2a \cdot e^{-U\Delta\tau/2}$
	1	$e^{-U\Delta\tau}$		1	$e^{-U\Delta\tau}$

となるので、式 (6.4) に定義しておけば両辺は完全に一致することがわかる。

この変換を物理的に解釈すると次のようなことになる。ある格子点 i にスピン $\uparrow$ の粒子がいたとしよう。式 (6.3) の右辺の指数によれば、このとき補助場は $s_i = 1$ の値をとった方がエネルギーを得ることになる（つまりボルツマン重みが大きい）。一方、スピン $\downarrow$ の粒子は補助場が $s_i = 1$ だとエネルギーを損ずる。結果として、スピン $\uparrow$ の粒子が既に存在するこの格子点 i にはスピン $\downarrow$ の粒子が入りにくいことになる。これは式 (6.3) の左辺のクーロン・ポテンシャルの効果の言い換えに外ならない。補助場 s_i がクーロン力を媒介する場としての役割を果たしているのである。この補助場はフェルミオンのスピン σ と同じ向きを向く傾向にあるので、フェルミオン・スピンの平均場のようなものとも考えることもできる。

式 (6.3) を使うと、式 (6.1) のポテンシャルの項は

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}} = \frac{1}{2^N} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \sum_{s_3=\pm 1} \exp\left(-\Delta\tau\hat{\tilde{V}}(s_1, s_2, s_3)\right) \quad (6.5)$$

となる。ただし、新しいポテンシャル $\hat{\tilde{V}}$ は

$$-\Delta\tau\hat{\tilde{V}}(s_1, s_2, s_3) \equiv \sum_{i=1}^3 \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \left[2a\sigma s_i - \left(\frac{U}{2} - \mu\right) \Delta\tau \right] \hat{n}_{i\sigma} \quad (6.6)$$

である。一般に N 個の格子点ならば、補助場も s_1 から s_N までの N 個が必要となる。

分配関数 (6.2) に式 (6.6) を使うと

$$\begin{aligned} Z &\equiv \text{Tr}_c e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \simeq Z_L \equiv \text{Tr}_c \left(e^{-\Delta\tau\hat{K}} e^{-\Delta\tau\hat{V}} \right)^L \\ &= \frac{1}{2^{NL}} \sum_{\{s\}} \text{Tr}_c \prod_{l=1}^L \left[\exp\left(-\Delta\tau\hat{K}\right) \exp\left(-\Delta\tau\hat{\tilde{V}}(s_{1,l}, s_{2,l}, s_{3,l})\right) \right] \end{aligned} \quad (6.7)$$

となる。補助場は各 Trotter 層にそれぞれ N 個（ここでは 3 個）が必要なので、全体では時空の格子点の数 NL だけ存在することになる。すなわち、

$$\{s\} \equiv s_{1,1}, s_{2,1}, s_{3,1}, s_{1,2}, s_{2,2}, s_{3,2}, \dots, s_{1,L}, s_{2,L}, s_{3,L}, \quad (6.8)$$

である。添え字の 1 つ目は実空間での位置を、2 つ目は Trotter 方向の位置を表すことにする。

式 (6.1) の運動エネルギー $\hat{K}$ も式 (6.6) の補助場を含むポテンシャル $\hat{\tilde{V}}$ も、今やスピン $\uparrow$ と $\downarrow$ の項の足し算 $\hat{K} = \hat{K}^\uparrow + \hat{K}^\downarrow$, $\hat{\tilde{V}} = \hat{\tilde{V}}^\uparrow + \hat{\tilde{V}}^\downarrow$ で書けている。スピン $\uparrow$ と $\downarrow$ の演算子は可換なので、指数関数型演算子を計算するときも別々に扱ってよい。すなわち

$$e^{-\Delta\tau\hat{K}} = e^{-\Delta\tau\hat{K}^\uparrow} e^{-\Delta\tau\hat{K}^\downarrow}, \quad e^{-\Delta\tau\hat{\tilde{V}}} = e^{-\Delta\tau\hat{\tilde{V}}^\uparrow} e^{-\Delta\tau\hat{\tilde{V}}^\downarrow}, \quad (6.9)$$

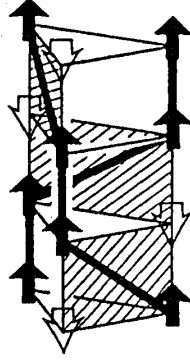


図 9: 補助場の配置例と、そのとき最も起こりやすいフェルミオンの運動（太線）。

となり、したがって式 (6.7) は [15]

$$Z_L = \frac{1}{2^{NL}} \sum_{\{s\}} W^\uparrow(\{s\}) W^\downarrow(\{s\}), \quad (6.10)$$

$$W^\sigma(\{s\}) \equiv \text{Tr}_c^\sigma \prod_{l=1}^L \left[\exp(-\Delta\tau \hat{K}^\sigma) \exp(-\Delta\tau \hat{V}^\sigma(s_{1,l}, s_{2,l}, s_{3,l})) \right], \quad (6.11)$$

と書ける（もちろん補助場 $\{s\}$ は $W^\uparrow(\{s\})$ と $W^\downarrow(\{s\})$ に共通である）。なお記号 Tr_c^σ は、片方のスピンの粒子が張る空間に限った対角和を表す。以降は片方のスピンの項 W^σ のみを計算し、特に必要のない限りスピン記号 σ は省略する。こうしてスピン $\uparrow$ とスピン $\downarrow$ の粒子間にあった相互作用が分解され、自由フェルミオンの模型に変換された。

式 (6.11) を別の角度から眺めると、これは $N \times L$ 個の格子点に並んだ補助場 $\{s\}$ が相互作用する系の分配関数である。その相互作用はボルツマン重み

$$w(\{s\}) \equiv W^\uparrow(\{s\}) W^\downarrow(\{s\}) \quad (6.12)$$

で定義される。この重みに従ってフリップ確率 (2.4) を計算して補助場の配置 $\{s\}$ を次々に発生させれば、式 (6.10) の和 $\sum_{\{s\}}$ に関してモンテカルロ・サンプリングすることができる。この重み w の対角和 Tr_c は解析的に計算できることが第 7 節でわかる。式 (6.10)-(6.11) で、先に補助場 $\{s\}$ について和をとってしまつてフェルミオンの対角和 Tr_c についてモンテカルロ計算するのが世界線法であったのに対し、フェルミオンの対角和を先に済ませてしまうのが以下で述べる SH 変換法であるといえる。後者の対角和の際に 5.3 節の最後で述べたような正負の重みの打ち消し合いが起こって、負符号問題が緩和されるのである。

6.2 重みの符号とハーフ・フィルドの場合

重み (6.12) は、ある与えられた補助場の配置 $\{s\}$ の中での、あらゆるフェルミオン「世界線」配置の重みを足し上げたものである。ところでこの重み w は、補助場 $\{s\}$ によっては負の値になる。式 (6.4) の下で述べたように、補助場が $+1$ をとっている格子点にはスピン $\uparrow$ のフェルミオンが入りやすいので、例えば図 9 のような補助場配置に対しては、あらゆるフェルミオン運動の中で図中の太線で示されたような「世界線」配置（重みは負）が最も好まれる [17]。そのため、他のフェルミ

オン配置の重みをすべて足し上げた（つまりフェルミオンの自由度を消去した）後も、依然として図 9 の補助場配置に対する重み w は負になっていると思われる。つまり SH 変換を用いたアルゴリズムにも「世界線」法と同じく第 5 節で述べた負符号問題が現れることになる。ただしここで強調しておくべきなのは、図 9 の補助場配置の重み (6.12) には、図中のフェルミオン配置のみが勘定されているのではなく、小さいながらも正の重みのフェルミオン配置が足されている。その効果で重みのオーダーは抑えられるので、世界線法の場合ほど負符号問題が深刻でなくなるのは第 5 節の最後で述べた通りである。

特に化学ポテンシャルが $\mu = U/2$ の場合には、重み (6.12) が常に正になることが以下のようにして示される [16]。そのためには、新しいフェルミオン演算子として

$$\hat{b}_{i,-\sigma} \equiv (-1)^{x_i+y_i} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \quad \hat{b}_{i,-\sigma}^\dagger \equiv (-1)^{x_i+y_i} \hat{c}_{i\sigma}, \quad (6.13)$$

を定義する [16]。ここで (x_i, y_i) は例えば 2 次元格子上での格子点 i の座標である。この変換 (6.13) は、 c -粒子のいないところに逆向き b -粒子が存在すると見なすことから、粒子-空孔変換であることがわかる。空孔の生成・消滅演算子 (6.13) に対して運動エネルギー (6.1) は、例えば $(x_j, y_j) = (x_i + 1, y_i)$ に対して

$$\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} = (-1)^{x_i+y_i+x_j+y_j} \hat{b}_{i,-\sigma} \hat{b}_{j,-\sigma}^\dagger = -\hat{b}_{i,-\sigma} \hat{b}_{j,-\sigma}^\dagger = \hat{b}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,-\sigma} \quad (6.14)$$

となるので、全体では

$$\hat{K}^\sigma \equiv -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,-\sigma} + \hat{b}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,-\sigma}) \equiv \hat{K}_b^{-\sigma} \quad (6.15)$$

となる。最後の添え字 b は空孔演算子に関するものであることを示す。一方、ポテンシャル (6.6) に現れる数演算子は

$$\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} = \hat{b}_{i,-\sigma} \hat{b}_{i,-\sigma}^\dagger = 1 - \hat{b}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,-\sigma} \quad (6.16)$$

と変換されるので、化学ポテンシャル $\mu = U/2$ の場合のポテンシャル (6.6) は

$$-\Delta\tau \hat{V}^\sigma = \sum_{i=1}^3 2a\sigma s_i \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} = \sum_{i=1}^3 2a(-\sigma) s_i \hat{b}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,-\sigma} + \sigma v_0 \equiv -\Delta\tau \hat{V}_b^{-\sigma} + \sigma v_0 \quad (6.17)$$

となる。ただし $v_0 \equiv 2a \sum_{i=1}^3 s_i$ とした。以上の変換で、スピン $\uparrow$ に対する重み (6.11) は、

$$W^\uparrow = \text{Tr}_b^\uparrow \prod_{l=1}^L \left[\exp(-\Delta\tau \hat{K}_b^\uparrow) \exp(-\Delta\tau \hat{V}_b^\uparrow) e^{v_0} \right] = W^\uparrow \exp\left(\sum_{l=1}^L v_0\right) \quad (6.18)$$

と変形されることになる。対角和は粒子演算子についてとっても空孔演算子についてとっても同じだからである。式 (6.18) より、あらゆる補助場配置 $\{s\}$ に対する重み (6.12) が

$$w(\{s\}) = W^\uparrow W^\downarrow = (W^\downarrow)^2 e^{\sum v_0} \geq 0 \quad (6.19)$$

となり、化学ポテンシャル $\mu = U/2$ の場合には負符号問題が全く現れないことがわかる*。

*この他にも負符号問題が発生しない場合がある。特に引力ハバード模型 ($U < 0$) は、何らかの機構で電子間に引力が働くという仮定を出発点として超伝導を研究しようという観点から、物理的興味の持たれる問題である [18]。

ところで式 (6.16) から、化学ポテンシャル $\mu = U/2$ の場合には $\langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \rangle = 1 - \langle \hat{b}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,-\sigma} \rangle$ となっているが、一方上で見たように粒子に対する分配関数と空孔に関する分配関数は全く同じ形をしているので、 $\langle \hat{b}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,-\sigma} \rangle = \langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \rangle$ も成り立っている。もともとスピン $\uparrow$ とスピン $\downarrow$ に関しては対称であるから、以上の議論より

$$\mu = U/2 \quad \text{のとき} \quad \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle = 1/2, \quad (6.20)$$

と結論される。粒子が詰められる限界の半分だけ存在することから、化学ポテンシャル $\mu = U/2$ の場合はハーフ・フィールドと呼ばれる。

第 7 節 フェルミオンの自由度の消去

前節で述べた SH 変換によって、相互作用するフェルミオンが、場 s の中で運動する相互作用しないフェルミオンに書き換えられたことになる。実は、ボゾン場の中の独立なフェルミオンの運動をモンテカルロ・シミュレーションするアルゴリズムは既に得られていた [19]。前節の変換の後には、そのアルゴリズムを適用するだけでよかったのである [16]。これを以下の 2 節にわたって述べよう。ここではまず、式 (6.11) の対角和 Tr_c が解析的に計算できることを示す。

7.1 演算子の 2 次形式

SH 変換によって、ハバード模型が形式的には粒子間相互作用のない形に書き換えられた。これをもう少し数学的な言葉で言うと、ハミルトニアンが粒子の生成・消滅演算子の 2 次形式で書けた、ということになる。すなわち、運動エネルギー (6.1) は

$$\hat{K}^\sigma = \begin{pmatrix} \hat{c}_{1\sigma}^\dagger & \hat{c}_{2\sigma}^\dagger & \hat{c}_{3\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \bar{K} \begin{pmatrix} \hat{c}_{1\sigma} \\ \hat{c}_{2\sigma} \\ \hat{c}_{3\sigma} \end{pmatrix}; \quad -\Delta\tau \bar{K} \equiv t\Delta\tau \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.1)$$

と書けている。さらに SH 変換の結果、ポテンシャル (6.6) の方も

$$\hat{V}^\sigma = \begin{pmatrix} \hat{c}_{1\sigma}^\dagger & \hat{c}_{2\sigma}^\dagger & \hat{c}_{3\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \bar{V}^\sigma \begin{pmatrix} \hat{c}_{1\sigma} \\ \hat{c}_{2\sigma} \\ \hat{c}_{3\sigma} \end{pmatrix}; \quad -\Delta\tau \bar{V}^\sigma \equiv \begin{pmatrix} h^\sigma(s_1) & & \\ & h^\sigma(s_2) & \\ & & h^\sigma(s_3) \end{pmatrix} \quad (7.2)$$

$$h^\sigma(s) \equiv 2a\sigma s - (U/2 - \mu)\Delta\tau, \quad (7.3)$$

と表せる。以降、これら 3×3 行列（一般には $N \times N$ 行列）を、記号の上にバーをつけて表記することにする。つまり、計算したい重み (6.11) は

$$W(\{s\}) = \text{Tr}_c \prod_{i=1}^L \left[\exp \left(-\Delta\tau \hat{c}_i^\dagger \bar{K}_{ij} \hat{c}_j \right) \exp \left(-\Delta\tau \hat{c}_i^\dagger \bar{V}_{ij}(s_{1,i}, s_{2,i}, s_{3,i}) \hat{c}_j \right) \right] \quad (7.4)$$

という形に書けている（重なった添え字 i や j については暗黙に和をとるものとする）。

2 次形式の演算子

$$\hat{A} \equiv \hat{c}_i^\dagger \bar{A}_{ij} \hat{c}_j = \begin{pmatrix} \hat{c}_1^\dagger & \hat{c}_2^\dagger & \hat{c}_3^\dagger \end{pmatrix} \bar{A} \begin{pmatrix} \hat{c}_1 \\ \hat{c}_2 \\ \hat{c}_3 \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

は、行列 $\overline{A}$ が対称ならば以下のような変形ができる。行列 $\overline{A}$ を対角化するユニタリ行列を $\overline{P}$ とする。すなわち、

$$\overline{P}^\dagger \overline{A} \overline{P} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3 \end{pmatrix}; \quad \overline{P}^\dagger \overline{P} = \overline{I}, \quad (7.6)$$

とする。行列 $\overline{I}$ は 3×3 の単位行列である。このとき、新しいフェルミオン演算子を

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \\ \hat{a}_3 \end{pmatrix} \equiv \overline{P}^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_1 \\ \hat{c}_2 \\ \hat{c}_3 \end{pmatrix}, \quad (\hat{a}_1^\dagger \ \hat{a}_2^\dagger \ \hat{a}_3^\dagger) \equiv (\hat{c}_1^\dagger \ \hat{c}_2^\dagger \ \hat{c}_3^\dagger) \overline{P}, \quad (7.7)$$

と定義しよう（これらの演算子 $\hat{a}^\dagger$ や $\hat{a}$ はフェルミオンの交換関係を正しく満たす）。式 (7.6) と (7.7) を使うと、2 次形式 (7.5) は標準形に直せて、

$$\begin{aligned} \hat{A} &= (\hat{c}_1^\dagger \ \hat{c}_2^\dagger \ \hat{c}_3^\dagger) \overline{P} \overline{P}^\dagger \overline{A} \overline{P} \overline{P}^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_1 \\ \hat{c}_2 \\ \hat{c}_3 \end{pmatrix} \\ &= (\hat{a}_1^\dagger \ \hat{a}_2^\dagger \ \hat{a}_3^\dagger) \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \\ \hat{a}_3 \end{pmatrix} = \sum_{\nu=1}^3 \lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu \end{aligned} \quad (7.8)$$

という形になる（式 (3.3) はその 1 例）。この形にしておくと指数関数型演算子 $\exp \hat{A}$ が

$$e^{\hat{A}} \equiv \exp (\hat{c}_i^\dagger \overline{A}_{ij} \hat{c}_j) = \exp \left(\sum_{\nu=1}^3 \lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu \right) = \prod_{\nu=1}^3 \exp (\lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu) \quad (7.9)$$

となる。

7.2 演算子等式の証明

式 (7.9) を使って、式 (7.4) の右辺を計算しやすくするための次のような等式を証明しよう [16]。任意の対称な 3×3 行列（一般には $N \times N$ 行列） $\overline{A}, \overline{B}$ に対して、

$$\exp (\hat{c}_i^\dagger \overline{B}_{ij} \hat{c}_j) \exp (\hat{c}_i^\dagger \overline{A}_{ij} \hat{c}_j) = \exp (\hat{c}_i^\dagger \overline{L}_{ij} \hat{c}_j) \quad (7.10)$$

となる。ただし、行列 $\overline{L}$ は

$$e^{\overline{B}} e^{\overline{A}} \equiv e^{\overline{L}} \quad (7.11)$$

によって定義される 3×3 行列である。

まず、演算子 $\exp \hat{A}$ が例えば 1 粒子状態 $\hat{c}_1^\dagger |0\rangle$ にどのように演算するかを調べる。この状態は式 (7.7) で定義される演算子を使えば、

$$\hat{c}_1^\dagger |0\rangle = \sum_{\mu=1}^3 \hat{a}_\mu^\dagger \overline{P}_{\mu 1}^\dagger |0\rangle \quad (7.12)$$

と表されるから、演算子 $\exp \hat{A}$ をかけると式 (7.9) の形を使って

$$\begin{aligned} e^{\hat{A}} \hat{c}_1^\dagger |0\rangle &= \sum_{\mu=1}^3 \bar{P}_{\mu 1}^\dagger \prod_{\nu=1}^3 \exp(\lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu) \hat{a}_\mu^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\mu=1}^3 \bar{P}_{\mu 1}^\dagger e^{\lambda_\mu} \hat{a}_\mu^\dagger |0\rangle \stackrel{(7.7)}{=} \sum_{i=1}^3 \sum_{\mu=1}^3 \bar{P}_{\mu 1}^\dagger e^{\lambda_\mu} \hat{c}_i^\dagger \bar{P}_{i\mu} |0\rangle \end{aligned} \quad (7.13)$$

となる。ところで式 (7.6) から、

$$\bar{P}^\dagger e^{\bar{A}} \bar{P} = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & & \\ & e^{\lambda_2} & \\ & & e^{\lambda_3} \end{pmatrix}, \quad \text{あるいは} \quad (e^{\bar{A}})_{ij} = \sum_{\mu=1}^3 \bar{P}_{i\mu} e^{\lambda_\mu} \bar{P}_{\mu j}^\dagger, \quad (7.14)$$

が成り立っている。同じ形が式 (7.13) の右辺に現れているから、結局

$$e^{\hat{A}} \hat{c}_1^\dagger |0\rangle = \sum_{i=1}^3 (e^{\bar{A}})_{i1} \hat{c}_i^\dagger |0\rangle \quad (7.15)$$

となった。この状態にさらに演算子 $\exp \hat{B} \equiv \exp(\hat{c}_i^\dagger \bar{B}_{ij} \hat{c}_j)$ を演算させよう。いったん行列 $\bar{B}$ を対角化する表示を経由すれば、式 (7.12)-(7.15) とまったく同じようにして、

$$e^{\hat{B}} \hat{c}_i^\dagger |0\rangle = \sum_{j=1}^3 (e^{\bar{B}})_{ji} \hat{c}_j^\dagger |0\rangle \quad (7.16)$$

となるから、

$$e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} \hat{c}_1^\dagger |0\rangle \stackrel{(7.15)}{=} \sum_{i=1}^3 (e^{\bar{A}})_{i1} e^{\hat{B}} \hat{c}_i^\dagger |0\rangle \stackrel{(7.16)}{=} \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 (e^{\bar{B}})_{ji} (e^{\bar{A}})_{i1} \hat{c}_j^\dagger |0\rangle \quad (7.17)$$

である。そこで行列 $\bar{L}$ を式 (7.11) と定義しておけば、

$$e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} \hat{c}_1^\dagger |0\rangle = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 (e^{\bar{B}})_{ji} (e^{\bar{A}})_{i1} \hat{c}_j^\dagger |0\rangle \stackrel{(7.11)}{=} \sum_{j=1}^3 (e^{\bar{L}})_{j1} \hat{c}_j^\dagger |0\rangle \stackrel{(7.15)}{=} e^{\hat{L}} \hat{c}_1^\dagger |0\rangle, \quad (7.18)$$

ただし、 $\hat{L} \equiv \hat{c}_i^\dagger \bar{L}_{ij} \hat{c}_j$ となる。つまり式 (7.10) の両辺の演算子は、少なくとも 1 粒子状態への演算に関しては同じ働きをすることが示せた。

次に 2 粒子状態への演算を調べてみる。例えば状態 $\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger |0\rangle$ に演算子 $\exp \hat{A}$ を演算すると、式 (7.12)-(7.15) と同じく

$$\begin{aligned} e^{\hat{A}} \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger |0\rangle &= \prod_{\nu=1}^3 \exp(\lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu) \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger |0\rangle = \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\eta=1}^3 \bar{P}_{\mu 1}^\dagger \bar{P}_{\eta 2}^\dagger \prod_{\nu=1}^3 \exp(\lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu) \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\eta^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\eta=1}^3 \bar{P}_{\mu 1}^\dagger \bar{P}_{\eta 2}^\dagger [e^{\lambda_\mu} \hat{a}_\mu^\dagger] [e^{\lambda_\eta} \hat{a}_\eta^\dagger] |0\rangle \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\eta=1}^3 [\bar{P}_{i\mu} e^{\lambda_\mu} \bar{P}_{\mu 1}^\dagger \hat{c}_i^\dagger] [\bar{P}_{j\eta} e^{\lambda_\eta} \bar{P}_{\eta 2}^\dagger \hat{c}_j^\dagger] |0\rangle \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (e^{\bar{A}})_{i1} (e^{\bar{A}})_{j2} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (7.19)$$

のように変形され、演算が粒子ごとに独立に行なわれていく様子がわかる。これに演算子 $\exp \hat{B}$ が演算するときも、やはり 1 粒子状態の場合 (7.16)-(7.18) と同様に

$$\begin{aligned}
 e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger |0\rangle &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (e^{\hat{A}})_{i1} (e^{\hat{A}})_{j2} e^{\hat{B}} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger |0\rangle \\
 &= \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (e^{\hat{B}})_{ki} (e^{\hat{A}})_{i1} (e^{\hat{B}})_{lj} (e^{\hat{A}})_{j2} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l^\dagger |0\rangle \\
 &= \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 (e^{\hat{L}})_{k1} (e^{\hat{L}})_{l2} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l^\dagger |0\rangle \stackrel{(7.19)}{=} e^{\hat{L}} \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger |0\rangle
 \end{aligned} \tag{7.20}$$

となる。このようにして、任意の多粒子状態に対して式 (7.10) の両辺が同じ働きをすることがわかる。つまり、両辺は演算子として等しい。これで式 (7.10) の証明を終えた。式 (7.10) を繰り返せば、いくつかの演算子に対して、

$$\exp(\hat{c}_i^\dagger \bar{A}_{ij} \hat{c}_j) \exp(\hat{c}_i^\dagger \bar{B}_{ij} \hat{c}_j) \cdots = \exp(\hat{c}_i^\dagger \bar{L}_{ij} \hat{c}_j), \tag{7.21}$$

ただし $\exp \bar{A} \exp \bar{B} \cdots \equiv \exp \bar{L}$, が言える。

式 (7.21) を使うと、重み (7.4) は

$$W(\{s\}) = \text{Tr}_c \exp(\hat{c}_i^\dagger \bar{H}_{ij}(\{s\}) \hat{c}_j), \tag{7.22}$$

という簡単な形に書き直せる [16]。ただし行列 $\bar{H}$ は、

$$\exp \bar{H}(\{s\}) \equiv \prod_{l=1}^L (\bar{A} \bar{B}); \quad \bar{A} \equiv \exp(-\Delta\tau \bar{K}), \quad \bar{B} \equiv \exp(-\Delta\tau \bar{V}(s_{1,l}, s_{2,l}, s_{3,l})) \tag{7.23}$$

で定義されている。なお、式 (7.1)-(7.2) より、

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} p & q & q \\ q & p & q \\ q & q & p \end{pmatrix}, \quad \bar{B} = \begin{pmatrix} b^\sigma(s_{1,l}) & & \\ & b^\sigma(s_{2,l}) & \\ & & b^\sigma(s_{3,l}) \end{pmatrix}, \tag{7.24}$$

$$p \equiv (e^{2t\Delta\tau} + 2e^{-t\Delta\tau}) / 3, \quad q \equiv (e^{2t\Delta\tau} - e^{-t\Delta\tau}) / 3, \tag{7.25}$$

$$b^\sigma(s) \equiv e^{h^\sigma(s)} \stackrel{(7.3)}{=} \exp \left[2a\sigma s - \left(\frac{U}{2} - \mu \right) \Delta\tau \right], \tag{7.26}$$

である。

7.3 対角和の計算

そこで次に式 (7.22) の対角和を計算しよう。それには、指数の 2 次形式を標準形に書き直すのが便利である。式 (7.6)-(7.7) のように、行列 $\bar{T}$ によって行列 $\bar{H}$ が

$$\bar{T}^{-1} \bar{H}(\{s\}) \bar{T} = \begin{pmatrix} \rho_1 & & \\ & \rho_2 & \\ & & \rho_3 \end{pmatrix} \tag{7.27}$$

と対角化されるとすると (ρ_i は一般には複素数)，新しいフェルミオン演算子を

$$\begin{pmatrix} \hat{d}_1 \\ \hat{d}_2 \\ \hat{d}_3 \end{pmatrix} \equiv \bar{T}^{-1} \begin{pmatrix} \hat{c}_1 \\ \hat{c}_2 \\ \hat{c}_3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \hat{d}_1^\dagger & \hat{d}_2^\dagger & \hat{d}_3^\dagger \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \hat{c}_1^\dagger & \hat{c}_2^\dagger & \hat{c}_3^\dagger \end{pmatrix} \bar{T} \quad (7.28)$$

と定義すれば，式 (7.22) は式 (7.9) のように

$$W(\{s\}) = \text{Tr}_c \prod_{\nu=1}^3 \exp(\rho_\nu \hat{d}_\nu^\dagger \hat{d}_\nu) \quad (7.29)$$

となる．ヒルベルト空間を張る完全形としては，演算子 $\hat{d}^\dagger$ を使った

$$\{|0\rangle, \hat{d}_1^\dagger|0\rangle, \hat{d}_2^\dagger|0\rangle, \hat{d}_3^\dagger|0\rangle, \hat{d}_2^\dagger\hat{d}_3^\dagger|0\rangle, \hat{d}_3^\dagger\hat{d}_1^\dagger|0\rangle, \hat{d}_1^\dagger\hat{d}_2^\dagger|0\rangle, \hat{d}_1^\dagger\hat{d}_2^\dagger\hat{d}_3^\dagger|0\rangle\} \quad (7.30)$$

を用いればよい．この基底によって式 (7.29) の演算子は

$$\prod_{\nu=1}^3 \exp(\rho_\nu \hat{d}_\nu^\dagger \hat{d}_\nu) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & 0 \\ & e^{\rho_1} & & & & & & \\ & & e^{\rho_2} & & & & & \\ & & & e^{\rho_3} & & & & \\ & & & & e^{\rho_2+\rho_3} & & & \\ & & & & & e^{\rho_3+\rho_1} & & \\ & & & & & & e^{\rho_1+\rho_2} & \\ 0 & & & & & & & e^{\rho_1+\rho_2+\rho_3} \end{pmatrix} \quad (7.31)$$

と表現されるから，その対角和 (7.29) は [16]

$$W(\{s\}) = (1 + e^{\rho_1})(1 + e^{\rho_2})(1 + e^{\rho_3}) = \det \left[\bar{I} + \begin{pmatrix} e^{\rho_1} & & \\ & e^{\rho_2} & \\ & & e^{\rho_3} \end{pmatrix} \right] \quad (7.32)$$

と計算される．ここで，行列 $\bar{I}$ は 3×3 の単位行列である．

もちろん式 (7.23) で定義される行列 $\bar{H}$ は補助場 $\{s\}$ に依存するので，その固有値 (7.27) をいちいち求めるのは大変であるが，式 (7.32) の右辺の形にしておけば，さらなる変形が可能である．一般に行列式は

$$\det A \cdot \det B = \det AB, \quad (7.33)$$

$$\det A \cdot \det A^{-1} = \det I = 1, \quad (7.34)$$

$$\det B \stackrel{(7.34)}{=} \det A \cdot \det B \cdot \det A^{-1} \stackrel{(7.33)}{=} \det ABA^{-1}, \quad (7.35)$$

などの性質を持っている．したがって式 (7.32) は [16,13]

$$\begin{aligned} W(\{s\}) &\stackrel{(7.35)}{=} \det \bar{T} \left[\bar{I} + \begin{pmatrix} e^{\rho_1} & & \\ & e^{\rho_2} & \\ & & e^{\rho_3} \end{pmatrix} \right] \bar{T}^{-1} \\ &= \det \left[\bar{I} + \bar{T} \begin{pmatrix} e^{\rho_1} & & \\ & e^{\rho_2} & \\ & & e^{\rho_3} \end{pmatrix} \bar{T}^{-1} \right] = \det [\bar{I} + \exp(\bar{H}(\{s\}))] \end{aligned} \quad (7.36)$$

となる。最後の変形には式 (7.14) と同様の

$$e^{\bar{H}} = \bar{T} \begin{pmatrix} e^{\rho_1} & & \\ & e^{\rho_2} & \\ & & e^{\rho_3} \end{pmatrix} \bar{T}^{-1} \quad (7.37)$$

を使っている。

以上で、フェルミオンの自由度は完全に消去できた。分配関数 (6.10) と補助場配置 $\{s\}$ に対する重み (6.12) は、

$$Z_L = \frac{1}{2^{NL}} \sum_{\{s\}} w(\{s\}); \quad (7.38)$$

$$w(\{s\}) \equiv \det \left[\bar{I} + \prod_{l=1}^L (\bar{A} \bar{B}^\dagger(\{s\})) \right] \cdot \det \left[\bar{I} + \prod_{l=1}^L (\bar{A} \bar{B}^\dagger(\{s\})) \right] \quad (7.39)$$

と計算されることがわかった。ここで行列 $\bar{A}, \bar{B}$ は式 (7.23)-(7.26) で与えられている。補助場は系全体にまたがる長距離の相互作用をしているが、古典系であることに変わりはない。式 (7.38) の左辺は $4^N \times 4^N$ の表現行列を持つ演算子の対角和の計算であるのに対して、右辺は $N \times N$ の行列の計算でしかないからである。このように計算が簡略化できるのは各粒子が独立に運動していることによる。実際にこの重みからフリップ確率 (2.4) を計算する方法は第 8 節で述べる。

7.4 物理量の測定

ある物理量 $\hat{Q}$ の期待値については、式 (4.9) と同様の変形により [13,16]

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle &\equiv \frac{1}{Z} \text{Tr}_c \hat{Q} e^{-\beta \hat{H}} \stackrel{(6.2)}{\simeq} \frac{1}{Z_L} \text{Tr}_c \hat{Q} \left(e^{-\Delta\tau \hat{K}} e^{-\Delta\tau \hat{V}} \right)^L \\ &\stackrel{(6.5)}{=} \frac{1}{Z_L} \sum_{\{s\}} \text{Tr}_c \hat{Q} \prod_{l=1}^L \left[\exp \left(-\Delta\tau \hat{K} \right) \exp \left(-\Delta\tau \hat{V}(s_{1,l}, s_{2,l}, s_{3,l}) \right) \right] \\ &\stackrel{(6.10)}{=} \frac{\sum_{\{s\}} \tilde{Q} W^\dagger(\{s\}) W^\dagger(\{s\})}{\sum_{\{s\}} W^\dagger(\{s\}) W^\dagger(\{s\})} \equiv \langle \langle \tilde{Q} \rangle \rangle \simeq \frac{1}{N_{\text{MCS}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{MCS}}} Q(\{s(n)\}) \end{aligned} \quad (7.40)$$

となる。ただし、記号 $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ は系 (7.38) に関する熱平均を表し、

$$\tilde{Q}(\{s\}) \equiv \text{Tr}_c \hat{Q} \prod_{l=1}^L \left[\exp \left(-\Delta\tau \hat{K} \right) \exp \left(-\Delta\tau \hat{V}(s_{1,l}, s_{2,l}, s_{3,l}) \right) \right] / (W^\dagger(\{s\}) W^\dagger(\{s\})) \quad (7.41)$$

とする。つまり、各モンテカルロ・ステップで $\tilde{Q}(\{s(n)\})$ という量を測定すればよい。

後で利用するので、具体的にグリーン関数に対する表式を求めておこう。2 体のグリーン関数は例えば $\langle \hat{Q} \rangle = \langle \hat{c}_{1\uparrow} \hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \rangle$ である。これに対する測定量 (7.41) は

$$\tilde{Q} \stackrel{(7.21)}{=} \text{Tr}_c \hat{c}_{1\uparrow} \hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \exp \left(\hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \bar{H}_{ij} \hat{c}_{j\uparrow} \right) / W^\dagger(\{s\}) \quad (7.42)$$

となる。行列 $\bar{H}$ の定義は式 (7.23)-(7.26) の通りである。分子の対角和は式 (7.27) の表示で計算するとわかりやすい。すなわち、

$$\text{Tr}_c \hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger \exp \left(\hat{c}_i^\dagger \bar{H}_{ij} \hat{c}_j \right) = \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\eta=1}^3 \bar{T}_{1\mu} \bar{T}_{\eta 1}^{-1} \left[\text{Tr}_c \hat{d}_\mu \hat{d}_\eta^\dagger \prod_{\nu=1}^3 \exp \left(\rho_\nu \hat{d}_\nu^\dagger \hat{d}_\nu \right) \right] \quad (7.43)$$

と変形される。右辺の演算子は式 (7.31) と同様に、例えば $\mu = \eta = 3$ に対して

$$\hat{d}_3 \hat{d}_3^\dagger \prod_{\nu=1}^3 \exp(\rho_\nu \hat{d}_\nu^\dagger \hat{d}_\nu) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & e^{\rho_1} & & & & \\ & & e^{\rho_2} & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & 0 & \\ & & & & & 0 \\ 0 & & & & & e^{\rho_1+\rho_2} \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (7.44)$$

と表現されるので、式 (7.43) の対角和は式 (7.32) と同様に

$$\text{Tr}_c \hat{d}_\mu \hat{d}_\eta^\dagger \prod_{\nu=1}^3 \exp(\rho_\nu \hat{d}_\nu^\dagger \hat{d}_\nu) = \delta_{\mu\eta} \prod_{\nu(\neq\mu)} (1 + e^{\rho_\nu}) \quad (7.45)$$

である。これを式 (7.43) に代入して、式 (7.42) は [13,16]

$$\begin{aligned} \tilde{Q} &= \frac{\text{Tr}_c \hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger \exp(\hat{c}_i^\dagger \bar{H}_{ij} \hat{c}_j)}{\text{Tr}_c \exp(\hat{c}_i^\dagger \bar{H}_{ij} \hat{c}_j)} = \sum_{\mu=1}^3 \bar{T}_{1\mu} \bar{T}_{\mu 1}^{-1} \frac{\prod_{\nu(\neq\mu)} (1 + e^{\rho_\nu})}{\prod_{\nu=1}^3 (1 + e^{\rho_\nu})} = \sum_{\mu=1}^3 \bar{T}_{1\mu} \frac{1}{(1 + e^{\rho_\mu})} \bar{T}_{\mu 1}^{-1} \\ &= \left(\bar{T} \begin{pmatrix} (1 + e^{\rho_1})^{-1} & & \\ & (1 + e^{\rho_2})^{-1} & \\ & & (1 + e^{\rho_3})^{-1} \end{pmatrix} \bar{T}^{-1} \right)_{11} = (\bar{I} + e^{\bar{H}})^{-1}_{11} \end{aligned} \quad (7.46)$$

となる。最後の変形には式 (7.27) による

$$\bar{T}^{-1} (\bar{I} + e^{\bar{H}})^{-1} \bar{T} = \begin{pmatrix} (1 + e^{\rho_1})^{-1} & & \\ & (1 + e^{\rho_2})^{-1} & \\ & & (1 + e^{\rho_3})^{-1} \end{pmatrix} \quad (7.47)$$

を使っている。一般に行列 $\bar{I} + \exp \bar{H}$ の逆行列

$$\bar{G} \equiv (\bar{I} + e^{\bar{H}})^{-1} \quad (7.48)$$

の各要素がグリーン関数の測定量に対応する。

第 8 節 スピンの更新のアルゴリズム

前節までの計算でハバード模型が、場 $\{s\}$ が相互作用する古典系 (7.38) に書き直せた。ボルツマン重み (7.39) を用いてフリップ確率 (2.4) を計算すれば、この系をモンテカルロ計算することができる。ただし補助場が互いに複雑な相互作用をしているため、ボルツマン重みの比を式 (2.7) のように簡単に求められるのかが心配になる。確かにこの補助場は他のすべての補助場と遠距離相互作用しており、近距離相互作用しかない場合よりは計算が複雑になる [19,16]。しかし $4^N \times 4^N$ 行列の計算ではなく $N \times N$ 行列の計算で済むという点では、量子系の困難を克服しているといえる。これを以下で具体的に調べて見よう。

例としてトロッター数を $L = 2$ とし、トロッター方向第 2 層の 1 番目の補助場の更新 $s_{1,2} \rightarrow -s_{1,2}$ に関するフリップ確率 (2.4) を求める。それには、ボルツマン重み (7.39) の比

$$X = \left| \frac{w(-s_{1,2})}{w(s_{1,2})} \right| = \left| \frac{W^\dagger(-s_{1,2})}{W^\dagger(s_{1,2})} \right| \cdot \left| \frac{W^\downarrow(-s_{1,2})}{W^\downarrow(s_{1,2})} \right| \equiv X^\uparrow X^\downarrow, \quad (8.1)$$

を求める。ただし、式 (7.23) と (7.36) より、

$$W^\sigma = \det \left[\bar{I} + \bar{A}_1 \bar{B}_1^\sigma \bar{A}_2 \bar{B}_2^\sigma(s_{1,2}) \right], \quad (8.2)$$

である。トロッター方向の位置を示す便宜上、行列 $\bar{A}, \bar{B}$ に番号 $l = 1, 2$ をふった。また $\Delta\tau \equiv \beta/L = \beta/2$ である。6.2 節で述べた通りハーフ・フィールドの場合以外ではボルツマン重み w が負になることがあるので、式 (8.1) では式 (5.10)-(5.11) のように絶対値を取っておく必要がある。

さて補助場のフリップ $s_{1,2} \rightarrow -s_{1,2}$ は、ボルツマン重みのうち行列 $\bar{B}_2$ を [19]

$$\bar{B}_2(s_{1,2}) \rightarrow \bar{B}_2(-s_{1,2}) = \bar{B}_2(s_{1,2}) \bar{\Delta}(s_{1,2}) \quad (8.3)$$

とする、つまり行列 $\bar{\Delta}$ をかける操作と表現できる。ただし、

$$\bar{\Delta}(s_{1,2}) = \begin{pmatrix} b(-s_{1,2})/b(s_{1,2}) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \bar{I} + \begin{pmatrix} \gamma(s_{1,2}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (8.4)$$

$$\gamma^\sigma(s) \equiv b^\sigma(-s)/b^\sigma(s) - 1 \stackrel{(7.26)}{=} e^{-4a\sigma s} - 1, \quad (8.5)$$

である。したがって、ボルツマン重みの比 (8.1) は

$$\frac{W(-s_{1,2})}{W(s_{1,2})} = \frac{\det [\bar{I} + \bar{A}_1 \bar{B}_1 \bar{A}_2 \bar{B}_2(s_{1,2}) \bar{\Delta}(s_{1,2})]}{\det [\bar{I} + \bar{A}_1 \bar{B}_1 \bar{A}_2 \bar{B}_2(s_{1,2})]} \quad (8.6)$$

となる。ここで、前節で求めた「グリーン関数」(7.48)、すなわち

$$\bar{G}^\sigma(\{s\}) \equiv \left(\bar{I} + \bar{A}_1 \bar{B}_1^\sigma \bar{A}_2 \bar{B}_2^\sigma(s_{1,2}) \right)^{-1} \quad (8.7)$$

を利用する。補助場のフリップ操作がこの行列を使って行えることが以下で示される。この行列 (8.7) の要素の形で系の状態を記憶しておくことができるのである。

まず、行列式の性質 (7.33)-(7.34) を使うと、式 (8.6) は

$$\begin{aligned} \frac{W(-s_{1,2})}{W(s_{1,2})} &\stackrel{(8.7)}{=} \frac{\det [\bar{I} + (\bar{G}^{-1} - \bar{I}) \bar{\Delta}(s_{1,2})]}{\det \bar{G}^{-1}} \\ &\stackrel{(7.34)}{=} \det \bar{G} \cdot \det [\bar{I} + (\bar{G}^{-1} - \bar{I}) \bar{\Delta}(s_{1,2})] \\ &\stackrel{(7.33)}{=} \det \bar{G} [\bar{I} + (\bar{G}^{-1} - \bar{I}) \bar{\Delta}] = \det [\bar{G} + \bar{\Delta} - \bar{G} \bar{\Delta}] \\ &= \det [\bar{I} + (\bar{I} - \bar{G}) (\bar{\Delta} - \bar{I})] \end{aligned} \quad (8.8)$$

となる。ここで行列 $\bar{\Delta} - \bar{I}$ は式 (8.4) からただ 1 つの要素しかもたない行列である。したがって

$$(\bar{I} - \bar{G}) (\bar{\Delta} - \bar{I}) = \gamma(s_{1,2}) \begin{pmatrix} 1 - \bar{G}_{11} & 0 & 0 \\ -\bar{G}_{21} & 0 & 0 \\ -\bar{G}_{31} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (8.9)$$

これを式(8.8)に代入して [19]

$$X^\sigma \equiv \left| \frac{W(-s_{1,2})}{W(s_{1,2})} \right| = \left| \det \begin{pmatrix} 1 + \gamma(1 - \bar{G}_{11}) & 0 & 0 \\ -\gamma\bar{G}_{21} & 1 & 0 \\ -\gamma\bar{G}_{31} & 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = \left| 1 + \gamma^\sigma(s_{1,2}) (1 - \bar{G}_{11}^\sigma(\{s\})) \right|, \quad (8.10)$$

となる. 式(8.1)から直ちにフリップ確率 $P_{\text{flip}}(s_{1,2} \rightarrow -s_{1,2}) = X^\dagger X^\downarrow / (1 + X^\dagger X^\downarrow)$ が計算できる. これと乱数を比較して, 補助場 $s_{1,2}$ をフリップするかどうか判断する.

さて次に実際にフリップしたとすると, 新しい行列

$$\bar{G}(-s_{1,2}) = [\bar{I} + \bar{A}_1 \bar{B}_1 \bar{A}_2 \bar{B}_2(-s_{1,2})]^{-1} = [\bar{I} + \bar{A}_1 \bar{B}_1 \bar{A}_2 \bar{B}_2(s_{1,2}) \bar{\Delta}(s_{1,2})]^{-1} \quad (8.11)$$

を構成し直さなくてはならない. 以降 $\bar{G}^{\text{old}} \equiv \bar{G}(s_{1,2})$, $\bar{G}^{\text{new}} \equiv \bar{G}(-s_{1,2})$ と書くことにする. 式(8.11)を式(8.7)を使って書き直すと,

$$\bar{G}^{\text{new}} = [\bar{I} + ((\bar{G}^{\text{old}})^{-1} - \bar{I}) \bar{\Delta}]^{-1}, \quad (8.12)$$

この右辺に $(\bar{G}^{\text{old}})^{-1} \bar{G}^{\text{old}}$ を右からかけると

$$\bar{G}^{\text{new}} = [\bar{G}^{\text{old}} + \bar{\Delta} - \bar{G}^{\text{old}} \bar{\Delta}]^{-1} \bar{G}^{\text{old}} = [\bar{I} + (\bar{I} - \bar{G}^{\text{old}}) (\bar{\Delta} - \bar{I})]^{-1} \bar{G}^{\text{old}} \equiv \bar{F}^{-1} \bar{G}^{\text{old}} \quad (8.13)$$

である. 式(8.9)より,

$$\bar{F} \equiv \bar{I} + (\bar{I} - \bar{G}^{\text{old}}) (\bar{\Delta} - \bar{I}) = \begin{pmatrix} X^\sigma & 0 & 0 \\ -\gamma(s_{1,2})\bar{G}_{21}^{\text{old}} & 1 & 0 \\ -\gamma(s_{1,2})\bar{G}_{31}^{\text{old}} & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (8.14)$$

となっている (X は式(8.10)で与えられている). 行列(8.14)の逆行列は書き下すことができ,

$$\bar{F}^{-1} = \begin{pmatrix} 1/X^\sigma & 0 & 0 \\ \gamma(s_{1,2})\bar{G}_{21}^{\text{old}}/X^\sigma & 1 & 0 \\ \gamma(s_{1,2})\bar{G}_{31}^{\text{old}}/X^\sigma & 0 & 1 \end{pmatrix} = \bar{I} + \frac{\gamma(s_{1,2})}{X^\sigma} \begin{pmatrix} \bar{G}_{11}^{\text{old}} - 1 & 0 & 0 \\ \bar{G}_{21}^{\text{old}} & 0 & 0 \\ \bar{G}_{31}^{\text{old}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.15)$$

である. この行列 $\bar{F}^{-1}$ を左から行列 $\bar{G}^{\text{old}}$ にかけることによって, 行列 $\bar{G}^{\text{new}}$ が求められる [19].

同じようにして, トロッター方向第2層の他の補助場 $s_{2,2}, s_{2,3}$ の更新を終えたとする. 次にはトロッター方向第1層の補助場の更新に向かわねばならない. ところで式(8.7)において, 第2層に関する行列 $\bar{B}_2$ が括弧の中の最も右側にかかっているので, 式(8.8)以下の変形が可能になった. 第1層を更新したいときは, 行列 $\bar{B}_1$ が最も右側に位置してほしい. そこで, 第1層の更新に移る際に行列 $\bar{G}$ を構成し直す. つまり, 新しい行列 [19]

$$\begin{aligned} \bar{G}' &\equiv (\bar{I} + \bar{A}_2 \bar{B}_2 \bar{A}_1 \bar{B}_1)^{-1} = [(\bar{A}_2 \bar{B}_2) (\bar{I} + \bar{A}_1 \bar{B}_1 \bar{A}_2 \bar{B}_2) (\bar{A}_2 \bar{B}_2)^{-1}]^{-1} \\ &= (\bar{A}_2 \bar{B}_2) \bar{G} (\bar{A}_2 \bar{B}_2)^{-1} \end{aligned} \quad (8.16)$$

に乗り換えて以降の更新を行う. ここで行列 $\bar{A}_2 \bar{B}_2$ は補助場の情報を用いて式(7.24)から求めなくてはならない.

以上のアルゴリズムを一般的にまとめると、次のようになる。まず最初に適当な初期状態 $\{s\}$ を選んで、行列 (8.7)

$$\overline{G}_L^\sigma(\{s\}) \equiv \left(\overline{I} + \overline{A}_1 \overline{B}_1^\sigma \overline{A}_2 \overline{B}_2^\sigma \cdots \overline{A}_L \overline{B}_L^\sigma \right)^{-1} \quad (8.17)$$

を計算する。その後 $n := 1$ から $n := N_{\text{MCS}}$ まで以下の操作 (I)-(II) を繰り返す。

(I) $l := L$ から $l := 1$ まで以下の操作 (1)-(2) を繰り返す。

(1) 格子点番号 $i := 1$ から $i := N$ まで以下の操作 (i)-(ii) を繰り返す。

(i) 第 l 層の i 番目の補助場を更新するために、式 (8.17) からフリップ確率

$$P_{\text{flip}}(s_{i,l} \rightarrow -s_{i,l}) = \frac{X^\uparrow X^\downarrow}{1 + X^\uparrow X^\downarrow}; \quad X^\sigma \equiv \left| 1 + \gamma^\sigma(s_{i,l}) \left(1 - \overline{G}_{ii}^\sigma(\{s\}) \right) \right| \quad (8.18)$$

を計算する。

(ii) フリップ確率 P_{flip} を乱数 R と比較して、条件 $R \leq P_{\text{flip}}$ の場合のみ行列 (8.15) を行列 $\overline{G}_l(\{s\})$ にかけて、新しい行列 $\overline{G}_l(\{s'\})$ とする。すなわち、

$$\left(\overline{G}_l^\sigma(\{s'\}) \right)_{jk} = \left(\overline{G}_l^\sigma(\{s\}) \right)_{jk} + \frac{\gamma^\sigma(s_{i,l})}{X^\sigma} \left[\left(\overline{G}_l^\sigma(\{s\}) \right)_{ji} - \delta_{ji} \right] \left(\overline{G}_l^\sigma(\{s\}) \right)_{ik} \quad (8.19)$$

である (添字 i について和をとっているのではない)。

(2) 行列 $\overline{G}_{l-1} = (\overline{A}_l \overline{B}_l) \overline{G}_l (\overline{A}_l \overline{B}_l)^{-1}$ を計算する。

(II) 物理量 $\tilde{Q}(\{s\})$ を測定する。

こうして新しい補助場状態が生成されていく。

さて、以上の手順の CPU 時間は次のように系のサイズに依存する。手順 (ii) は行列 (8.15) を行列 $\overline{G}$ にかける操作である。行列 (8.15) は単位行列 $\overline{I}$ の部分を除けば 1 列にしか要素がないので、新しい行列の要素 1 個を求めるには 1 回の演算でよい。求めるべき行列要素は N^2 個あるから、手順 (ii) (1 個の補助場の更新) にかかる CPU 時間は N^2 に比例する。これを NL 回繰り返すから、系全体を更新するのにかかる時間は $N^3 L$ に比例して大きくなる。一方、手順 (2) では手順 (ii) と違って要素が詰まった行列同士のかけ算である。1 個の行列要素を求めるには N 回の演算が必要なので、行列全体では N^3 に比例する時間がかかる。系全体を更新するのに手順 (2) は L 回行われるから、その CPU 時間はやはり $N^3 L$ に比例する。

つまり第 6 節 から述べてきたアルゴリズムでは、シミュレーションに要する時間は $N^3 L$ に比例する [20]。一方、「世界線」法によるアルゴリズムでは第 4 節の最後で述べたように CPU 時間は NL に比例する。この点で SH 変換法は多少不利である。これは補助場が遠距離相互作用をしているからである。しかし第 5 節で述べたように、負符号問題に関してはこちらのアルゴリズムが有利である (特にハーフ・フィールドの場合には、負符号問題は全く現れない)。このため 2 次元以上のハバード模型については、専ら SH 変換を用いたモンテカルロ計算が行われてきた [16, 21, 22]。

第 9 節 その後の展開

以上で SH 変換を用いたアルゴリズムの紹介を終えた。ここでは以後の改良などを説明しよう。

9.1 行列計算の丸め誤差問題

SH 変換を用いるアルゴリズムで「世界線」法よりも負符号問題は緩和された。しかしより低温に近付こうとすると新しい問題が認識され始めた。

負符号問題は非常に大きな値をもつ重みのために、知りたい量が統計誤差の中に埋もれてしまうことであった。SH 変換法ではこの大きな値の処理をボルツマン重み計算 (7.39) の段階に押しつけたのである。しかしここで、計算機の演算はあくまで近似計算に過ぎないことを思い起こさねばならない。数値は常に有限の桁数以下を切り捨てられている。例えば FORTRAN の単精度実数計算で 1 に 1.0×10^{-7} を 100 回加えても結果は 1 のままである。後者は前者の丸め誤差 (計算機イブシロン) より小さいからである。正しい答えを得るには演算の順序を変えて、 1.0×10^{-7} を先に 100 回加え合わせてから 1 に足し込まなければいけない。

式 (7.24) の行列 $\bar{A}, \bar{B}$ の要素 (7.25), (7.26) は $\beta \rightarrow \infty$ あるいは $\Delta\tau \rightarrow \infty$ となるにつれて、非常に大きな値 $\exp(2t\Delta\tau)$, $\exp(2a)$ と非常に小さな値 $\exp(-t\Delta\tau)$, $\exp(-2a)$ とを含むようになる。そのような行列の掛け算では、演算の手順に注意を払う必要がある。第 8 節の最後で述べたアルゴリズムのうち、手順 (2) の行列計算では丸め誤差がつきまとう。そこで定期的に $\bar{G}_l$ をその定義

$$\bar{G}_l \equiv [\bar{I} + \bar{A}_{l+1}\bar{B}_{l+1} \cdots \bar{A}_L\bar{B}_L\bar{A}_1\bar{B}_1 \cdots \bar{A}_l\bar{B}_l]^{-1} \quad (9.1)$$

に戻って計算し直さなくてはならない (この計算時間も N^3L に比例する)。このとき行列計算をそのまま実行すると丸め誤差によって正しい答えが得られない。この丸め誤差問題は行列計算の手順を工夫することで解消されることが Sorella たちによって指摘された [23]。大きな行列要素と小さな行列要素を別々の部分空間に分けるような直交化をしてから行列の掛け算をすれば、大きな量は大きな量同士、小さな量は小さな量同士の演算になるので丸め誤差を起こしにくい。

行列 $\bar{A}\bar{B}$ を m 個掛けた行列 $\bar{a}_1 \equiv \bar{A}_{l-m+1}\bar{B}_{l-m+1} \cdots \bar{A}_l\bar{B}_l$ は誤差なく計算できるとしよう。低温では m は十分に小さな整数としなければならない。この行列 $\bar{a}_1$ をグラム-シュミットの直交化法を用いて QDR 分解 [24]

$$\bar{a}_1 \equiv \bar{A}_{l-m+1}\bar{B}_{l-m+1} \cdots \bar{A}_l\bar{B}_l = \bar{Q}_1\bar{D}_1\bar{R}_1 \quad (9.2)$$

する。ここで $\bar{Q}_1$ は直交行列、 $\bar{D}_1$ は対角行列、 $\bar{R}_1$ は対角要素が 1 の上三角行列

$$\bar{Q}_1 = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots \\ q_{21} & q_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \bar{D}_1 = \begin{pmatrix} d_1 & & \\ & d_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \quad \bar{R}_1 = \begin{pmatrix} 1 & r_{12} & \cdots \\ & 1 & \cdots \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \quad (9.3)$$

という構造をしている。行列 $\bar{Q}_1$ は基底変換行列なので、その要素はいずれも 1 程度の量である。行列 $\bar{R}_1$ の要素も実際には互いに同程度の大きさである。それに対して行列 $\bar{D}_1$ の対角要素には非常に大きな値から非常に小さな値までが並んでいる。行列 (9.2) に更に m 個の $\bar{A}\bar{B}$ を掛けて

$$\bar{a}_2 \equiv \bar{A}_{l-2m+1}\bar{B}_{l-2m+1} \cdots \bar{A}_l\bar{B}_l = \bar{A}_{l-2m+1}\bar{B}_{l-2m+1} \cdots \bar{A}_{l-m}\bar{B}_{l-m}\bar{Q}_1\bar{D}_1\bar{R}_1 \quad (9.4)$$

を計算したい。個数 m は十分に小さいから $\bar{A}_{l-2m+1}\bar{B}_{l-2m+1} \cdots \bar{A}_{l-m}\bar{B}_{l-m}$ は誤差なく計算できる。行列 $\bar{Q}_1$ の要素は 1 程度の値なので、これを右から掛ける計算

$$\bar{A}_{l-2m+1}\bar{B}_{l-2m+1} \cdots \bar{A}_{l-m}\bar{B}_{l-m}\bar{Q}_1 = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots \\ x_{21} & x_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

も可能だ. この行列要素 x は同程度の大きさとしてよい. 次に行列 $\bar{D}_1$ は対角行列なので, それを掛け算すると行列の各列の大きさがそれぞれ同時に変わる. ここに $\bar{R}_1$ を掛けてしまうと丸め誤差を引き起こすので, その前に再び

$$\bar{A}_{l-2m+1}\bar{B}_{l-2m+1}\cdots\bar{A}_{l-m}\bar{B}_{l-m}\bar{Q}_1\bar{D}_1 = \begin{pmatrix} d_{1x_{11}} & d_{2x_{12}} & \cdots \\ d_{1x_{21}} & d_{2x_{22}} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \bar{Q}_2\bar{D}_2\bar{R}_2' \quad (9.6)$$

と QDR 分解しておく. グラム-シュミットの直交化では同じ列に属する要素間にしか加減算を行わないので, この QDR 分解は丸め誤差なく計算できるのである. 新たな上三角行列を $\bar{R}_2 \equiv \bar{R}_2'\bar{R}_1$ と定義すれば,

$$\bar{a}_2 \equiv \bar{A}_{l-2m+1}\bar{B}_{l-2m+1}\cdots\bar{A}_l\bar{B}_l = \bar{Q}_2\bar{D}_2\bar{R}_2'\bar{R}_1 = \bar{Q}_2\bar{D}_2\bar{R}_2 \quad (9.7)$$

の形に帰着した. 更に $\bar{A}\bar{B}$ を m 回掛ける場合も同様の手順を踏めばよい. こうして [24]

$$\bar{A}_{l+1}\bar{B}_{l+1}\cdots\bar{A}_L\bar{B}_L\bar{A}_1\bar{B}_1\cdots\bar{A}_l\bar{B}_l = \bar{Q}_{L/m}\bar{D}_{L/m}\bar{R}_{L/m} \quad (9.8)$$

とできる. グリーン関数 (9.1) を計算する際にも注意を要する. このときは

$$\bar{G}_l^{-1} = \bar{I} + \bar{Q}_{L/m}\bar{D}_{L/m}\bar{R}_{L/m} = \bar{Q}_{L/m}(\bar{Q}_{L/m}^{-1}\bar{R}_{L/m}^{-1} + \bar{D}_{L/m})\bar{R}_{L/m} = \bar{Q}_{L/m}\bar{Q}'\bar{D}\bar{R}'\bar{R}_{L/m} \quad (9.9)$$

とする. 最後の変形では括弧 $(\cdots)$ の中を計算して再び QDR 分解している. 行列 $\bar{Q} \equiv \bar{Q}_{L/m}\bar{Q}'$, $\bar{R} \equiv \bar{R}'\bar{R}_{L/m}$ は計算できて, 結局 $\bar{G}_l = \bar{R}^{-1}\bar{D}^{-1}\bar{Q}^{-1}$ と求められた [24].

以上の手順によって丸め誤差は避けられ, より低温でのモンテカルロ・シミュレーションが可能になった [23-24].

9.2 絶対零度の極限

丸め誤差を克服した後, 残された問題は再び負符号問題である. これに関して最近, $\beta \rightarrow \infty$ の極限の情報ならば外挿によって比較的精度が得られるという議論がされている [26-28].

近似分配関数 Z_L で記述される系の基底状態のエネルギーを E_g とすると, 低温で (ただし, あくまで Trotter 数の十分大きい範囲 $L \gg \beta$ で)

$$\beta/L \rightarrow 0, \quad \beta \rightarrow \infty \quad \text{のとき} \quad Z_L \propto e^{-\beta E_g} \quad (9.10)$$

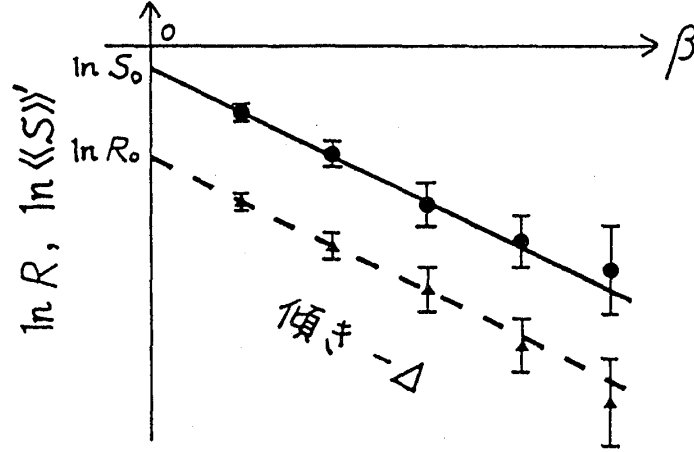
の振舞をすると思われる. 一方, 式 (5.11) のように絶対値をつけた重みによって定義される「系」 Z_L' の基底状態エネルギーを E_g' とすると, 同じように [11,26]

$$\beta/L \rightarrow 0, \quad \beta \rightarrow \infty \quad \text{のとき} \quad Z_L' \propto e^{-\beta E_g'} \quad (9.11)$$

と振舞うと考えられる. 式 (9.10) と (9.11) を組み合わせると, 式 (5.14) の符号 $\langle\langle S \rangle\rangle'$ の値は [11,26]

$$\beta/L \rightarrow 0, \quad \beta \rightarrow \infty \quad \text{のとき} \quad \langle\langle S \rangle\rangle' \simeq S_0 e^{-\beta \Delta}, \quad \Delta \equiv E_g - E_g' > 0, \quad (9.12)$$

の形で小さくなっていくものと思われる. これを利用すると図 10 のようなプロットができて, 複数の β でのデータ点のフィットから Δ と S_0 を求められる. いくつかのデータ点を使うことで誤差は


 図 10: 低温での符号 $\langle\langle S \rangle\rangle'$ (実線) と補正比 R (破線) の β 依存性.

ある程度小さくできる. ところで Z_L' の「系」は低温でも負符号問題を起こさずにモンテカルロ計算できるわけだから, その「基底エネルギー」 E_g' は評価しやすい. その値から $E_g = E_g' + \Delta$ を使って求めたい Z_L の基底エネルギーが評価できる [26].

一般の物理量については次の議論ができる [27]. 評価の難しい量 $\langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle$ に対して, 「系」 Z_L' における重みの符号を考えない「物理量」 $\langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle' \equiv \sum_{\Psi} w' \tilde{Q} / \sum_{\Psi} w'$ は評価しやすい. そこで両者をつなぐ「補正比」 $R \equiv \langle\langle S \tilde{Q} \rangle\rangle' / \langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle'$ という量を考えよう [27]. 式 (5.15) の左辺 $\langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle$ が $\beta \rightarrow \infty$ で有限の値をもつために, 式 (5.15) の右辺で分子の $\langle\langle S \tilde{Q} \rangle\rangle'$ も $\beta \rightarrow \infty$ で分母の $\langle\langle S \rangle\rangle'$ と同じ振舞 $\langle\langle S \tilde{Q} \rangle\rangle' \propto \exp(-\beta \Delta)$ をしている必要がある. 「物理量」 $\langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle'$ も $\beta \rightarrow \infty$ である有限の値に収束するとすると,

$$\beta/L \rightarrow 0, \quad \beta \rightarrow \infty \quad \text{のとき} \quad R \equiv \langle\langle S \tilde{Q} \rangle\rangle' / \langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle' \simeq R_0 e^{-\beta \Delta} \quad (9.13)$$

の形にフィットできるはずである. そこで再び図 10 のプロットをすれば R_0 が評価できる. これを式 (9.12) による S_0 の評価と組み合わせて, 式 (5.15) から基底状態の物理量が [27]

$$\beta/L \rightarrow 0, \quad \beta \rightarrow \infty \quad \text{のとき} \quad \langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle = \langle\langle S \tilde{Q} \rangle\rangle' / \langle\langle S \rangle\rangle' = R \times \langle\langle \tilde{Q} \rangle\rangle' / \langle\langle S \rangle\rangle' \simeq \langle\langle Q \rangle\rangle' \times R_0 / S_0 \quad (9.14)$$

として求められる*.

このような評価法を使ったモンテカルロ計算は現在進行中である [26, 27]. 基底状態についての情報についてのみ知りたいのであれば, 分配関数 $Z \equiv \sum_i \langle \psi_i | \exp(-\beta \hat{H}) | \psi_i \rangle$ でなくても基底状態を含む状態 $|\Psi\rangle$ の行列要素 $\langle \Psi | \exp(-\beta \hat{H}) | \Psi \rangle$ を求めればよいので, 以上で述べたアルゴリズムを多少変更した計算も行なわれている [21, 23-27].

第 10 節 t - J 模型の量子モンテカルロ・アルゴリズム

以上に述べてきた経緯の過程で 2 次元ハバード模型についてはおおよその結論が得られている. 基底状態は, ハーフ・フィルド $\mu = U/2$ の場合に反強磁性の不導体, それ以外の場合が常磁性の金属と考えられている [16]. つまり, あらゆるパラメータ領域で超伝導は存在しないらしいのである.

* $\langle\langle S \tilde{Q} \rangle\rangle' \propto \exp(-\beta \Delta)$ の $\beta \rightarrow \infty$ の収束は遅く, 補正比 R の方が評価しやすい.

それに代わってハバード模型の極限として導入された t - J 模型[29] が、高温超伝導体の候補として有望視され始めた [30]. ハバード模型でクーロン斥力が非常に大きい場合、フェルミオンは同じ格子点に 1 つしか入れない。ハーフ・フィールドの場合にはフェルミオンは全く動けなくなり、格子点に付随したスピンとしての役割しか果さなくなる。このスピンは格子点間で反強磁性の相互作用をすることがわかるので、これは反強磁性ハイゼンベルグ模型に外ならない [31]. しかし粒子数がハーフ・フィールドよりいくらか少ない場合、フェルミオン・スピン間の反強磁性の相互作用に加えて、フェルミオンの運動エネルギーの項が存在する。すなわちハミルトニアンは [29]

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,J} \equiv -t \sum_{(i,j)} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + \hat{a}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma} \right) + J \sum_{(i,j)} \hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j \quad (10.1)$$

$$\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \equiv (1 - \hat{n}_{i,-\sigma}) \hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \quad \hat{a}_{i\sigma} \equiv \hat{c}_{i\sigma} (1 - \hat{n}_{i,-\sigma}), \quad (10.2)$$

である。 α -粒子は粒子が既に存在する格子点には移動できないことがわかる。また、ベクトル演算子 $\hat{\sigma}$ はフェルミオンのスピンを表し、

$$\hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j \equiv 2 (\hat{\sigma}_i^+ \hat{\sigma}_j^- + \hat{\sigma}_i^- \hat{\sigma}_j^+) + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z, \quad \hat{\sigma}^+ \equiv \hat{c}_\downarrow^\dagger \hat{c}_\uparrow, \quad \hat{\sigma}^- \equiv \hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow, \quad \hat{\sigma}^z \equiv (\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow)/2, \quad (10.3)$$

と定義されている。この演算子が通常のスピン演算子の交換関係 $[\hat{\sigma}^+, \hat{\sigma}^-] = 2\hat{\sigma}^z$, $[\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^\pm] = \pm \hat{\sigma}^\pm$ を満たすことはすぐ確かめられる。

t - J 模型は 1 次元の厳密対角化による計算から高温超伝導体の磁気的性質などをよく再現していることがわかっており [25], 2 次元系の数値計算が待たれている。しかしそれには 1 つのネックがあった。上で述べた 2 粒子占有を禁ずる条件である。分配関数の対角和を取るときには、同じ格子点に 2 つの粒子が入った状態を除いたヒルベルト空間で計算しなくてはならない。このような局所的制限を前述のモンテカルロのアルゴリズムの中でどのように実現すればよいかわからなかったのである。

しかし、最近になってそのアルゴリズムが考案されたので [32], これを以下に説明しよう。まず簡単のため、ハミルトニアン (10.1) のうち運動エネルギーの項のみを扱う (t 模型 [33])。すなわち、

$$\hat{\mathcal{H}}_t \equiv -t \sum_{(i,j)} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + \hat{a}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma} \right) \quad (10.4)$$

である。これに対する分配関数 $Z^t(\beta) \equiv \text{Tr}'_c \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_t)$ を求める問題を考える。ここで、記号 Tr'_c は上で述べたように 2 粒子占有状態を除いた ヒルベルト空間の中での対角和である。この対角和は計算しにくいので、次のように通常の対角和 Tr_c で近似する。つまり [32]

$$Z^t(\beta) = \text{Tr}'_c \left[\exp(-\Delta\tau \hat{\mathcal{H}}_t) \right]^L \simeq \text{Tr}_c \left[\exp(-\Delta\tau \hat{K}) \prod_{i=1}^N (1 - \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}) \right]^L; \quad \Delta\tau \equiv \frac{\beta}{L} \quad (10.5)$$

とする。ただし $\hat{K}$ はハバード模型 (3.1) の運動エネルギー項、また演算子 $1 - \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ は、格子点 i を 2 粒子が占有している状態に対してのみ 0 を与える。式 (10.5) は次のように理解される。2 粒子占有のない状態 $|\psi_i\rangle$ の間の行列要素

$$\langle \psi_i | \left[\exp(-\Delta\tau \hat{K}) \prod_{i=1}^N (1 - \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}) \right]^L | \psi_i \rangle \quad (10.6)$$

を計算する際、状態 $|\psi\rangle$ に演算子 $\exp(-\Delta\tau \hat{K})$ が演算するたびに、2 粒子占有のある状態が現れてしまう。そこで直ちに Gutzwiller 射影演算子 $\hat{P}_d \equiv \prod_{i=1}^N (1 - \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow})$ を演算して、そういう状態

を排除してしまうのである。この操作を有限回繰り返しただけでは近似に過ぎないが、極限 $L \rightarrow \infty$ では正しい値に近づく。

式 (10.5) の右辺にはこのままでは 2 体の演算子 $\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$ が含まれているので、以下の変換 [32,34]

$$\begin{aligned} 1 - \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} &= [(1 + \hat{n}_{i\uparrow})(1 - \hat{n}_{i\downarrow}) + (1 - \hat{n}_{i\uparrow})(1 + \hat{n}_{i\downarrow})] / 2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{s_i=\pm 1} (1 + s_i \hat{n}_{i\uparrow})(1 - s_i \hat{n}_{i\downarrow}) = \frac{1}{2} \sum_{s_i=\pm 1} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (1 + \sigma s_i \hat{n}_{i\sigma}) \end{aligned} \quad (10.7)$$

を行う。運動エネルギー $\hat{K}$ も式 (6.9) のようにスピン $\uparrow$ と スピン $\downarrow$ の項に分けられるので、式 (10.7) を式 (10.5) に代入して近似分配関数は

$$Z_L^t \equiv \text{Tr}_c \left[\exp(-\Delta\tau \hat{K}) \prod_{i=1}^N (1 - \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}) \right]^L = \frac{1}{2^{NL}} \sum_{\{s\}} W^\uparrow(\{s\}) W^\downarrow(\{s\}), \quad (10.8)$$

$$W^\sigma(\{s\}) \equiv \text{Tr}_c^\sigma \prod_{i=1}^L \left[\exp(-\Delta\tau \hat{K}) \prod_{i=1}^N (1 + \sigma s_{i,l} \hat{n}_{i\sigma}) \right], \quad (10.9)$$

である。変数 $\{s\}$ は NL 個用意している。この形にすると、ハバード模型の場合の式 (6.10)-(6.11) との類似性は明らかである。実際、両者は次のような極限で一致している。ハバード模型の粒子間相互作用演算子 $\exp(-\Delta\tau U \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow})$ において極限 $U \rightarrow \infty$ をとると、

$$\lim_{U \rightarrow \infty} \exp(-\Delta\tau U \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}) = \begin{cases} 1, & \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} = 0 \text{ のとき,} \\ 0, & \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} = 1 \text{ のとき,} \end{cases} = 1 - \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} \quad (10.10)$$

となる。つまり、分配関数 (10.5) は式 (6.7) 1 行目右辺の分配関数 Z_L の $U \rightarrow \infty$ の極限である。SH 変換 (6.3) も、式 (6.4) による $\exp(2a - U\Delta\tau/2) = 2$ という条件に注意して極限 $U \rightarrow \infty$ をとれば式 (10.7) に帰着することがわかる。

式 (10.9) の対角和を計算すると式 (8.2) と同じ形になる [32,34]。ただし極限 $U \rightarrow \infty$ で式 (7.26) のパラメータ b が $\lim_{U \rightarrow \infty} b^\sigma(s) = 1 + \sigma s$ となるので、行列 $\overline{B}$ は式 (7.24) の代わりに

$$\lim_{U \rightarrow \infty} \overline{B}_l^\sigma = \begin{pmatrix} 1 + \sigma s_{1,l} & & \\ & 1 + \sigma s_{2,l} & \\ & & 1 + \sigma s_{3,l} \end{pmatrix} \quad (10.11)$$

と変更しておく。

スピン更新のアルゴリズムに関しては第 8 節をそのまま流用するわけにはいかない。式 (8.5) のパラメータ γ は $\sigma s = -1$ のときに極限 $\beta \rightarrow \infty$ で発散してしまうからである。したがってスピンの更新ごとに行列式を計算し直さなくてはならない。これには $N^3 L^2$ および $N^4 L$ に比例する CPU 時間を要する [32,34] ので「世界線」法に比べて一段と不利になるが、改善の余地はあるかも知れない。

次に t 模型 (10.4) に反強磁性相互作用を付け加えて t - J 模型にするには、新たな SH 変換 [32,34]

$$e^{-\beta J \hat{\sigma}_i^+ \hat{\sigma}_j^-} \equiv \exp(-\beta J \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow}) = \frac{1}{2} \sum_{s'_{ij}=\pm 1} \exp(a' s'_{ij} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow}) \cdot \exp(a' s'_{ij} \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}), \quad (10.12)$$

$$a' \equiv \sqrt{\beta J}, \quad (10.13)$$

を導入すれば、フェルミオン演算子の 2 次形式に書けることになる。変換 (10.12) は両辺を指数で展開することによって確かめられる。左辺の 2 次 $(\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow})^2$ 以降の項は同じフェルミオン演算子が 2 度現れるから 0 になって、

$$(\text{左辺}) = 1 - \beta J \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \quad (10.14)$$

である。同じく右辺の展開でも 2 次以降が消えて

$$(\text{右辺}) = \frac{1}{2} \sum_{s_{ij}=\pm 1} \left(1 + a' s_{ij} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow}\right) \cdot \left(1 + a' s_{ij} \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}\right) = 1 + (a')^2 \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \quad (10.15)$$

となる。式 (10.14) と (10.15) を見比べて式 (10.13) のようにとれば変換 (10.12) が成り立つことがわかる。

他の反強磁性項もそれぞれ新しい SH 変換を見つけることができる。2 次形式で書ければ第 7 節以降の式変形が使えるので、同様のモンテカルロ計算が行えるはずである。

第 11 節 最後に

以上で、電子系の量子モンテカルロ・アルゴリズムを述べてきた。これはちょうどここ 10 年間の方法論発展の歴史を追ってきたことに対応している。高温超伝導体への興味と共に、まだまだ研究は進展中と言えるだろう。

量子モンテカルロ法が 2 次元以上で行なわれ始めた頃、負符号問題は電子系に逃れられないものと考えられた部分があったようである。しかし SH 変換により少なくともそれを緩和する方法がわかり、具体的な成果を上げてきた。今後計算機はますます発展するだろうが、その性能向上に頼り切るのではなく、更に新しい方法論の開発こそ目指されるべきであろう。この解説がその一助となれば幸いである。

謝辞

本稿を書くにあたって東京大学物性研究所の今田正俊助教授の東京大学における集中講義「高温超伝導と計算物理」(1990/11/28-30)、および科研費総合研究研究会における講演「フェルミオン系のシミュレーションの問題点」(1991/1/9)を参考にさせていただきました。物性研究所の古川信夫氏には様々な疑問点について教えて頂きました。いくつかの脚注は古川氏の示唆に基づくものです。またプレプリント [32] を紹介して下さり、グラスマン変数を使って書かれている原論文の式変形をわかりやすい形で解説して頂きました。その他、鈴木増雄教授、香取真理助手と鈴木研究室の皆様に種々の点を議論して頂きました。以上の方々にこの場を借りて感謝致します。

参考文献

- [1] K. Binder, ed., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Topics Curr. Phys. 7, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg, 1986); *Application of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, *ibid.* 36, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg, 1987); K. Binder and D.W. Herrmann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, an Introduction*, Solid-State Sciences 80 (Springer, Berlin, Heidelberg, 1988).

- [2] J. Hubbard, Electron Correlations in Narrow Energy Bands, *Proc. R. Soc. London* **A276** (1963) 283-257; II. The Degenerate Band Case, *ibid.* **277** (1964) 237-259; III. An Improved Solution, *ibid.* **281** (1964) 401-419; IV. The Atomic Representation, *ibid.* **285** (1965) 542-560; V. A Perturbational Expansion about the Atomic Limit, *ibid.* **296** (1966) 82-99; VI. The Connexion with Many-Body Perturbation Theory, *ibid.* **296** (1966) 100-112.
- [3] H. De Raedt and A. Lagendijk, Monte Carlo Simulation of Quantum Statistical Lattice Models, *Phys. Rep.* **127** (1985) 233-307: 鈴木 増雄, 宮下 精二, 高須 昌子, 量子系のモンテカルロ法, *数理科学* **268** (1985) 70-77; M. Suzuki, Quantum Statistical Monte Carlo Methods and Applications to Spin Systems, *J. Stat. Phys.* **43** (1986) 883-909: 宮下 精二, 量子モンテカルロ法 (その 1), *固体物理* **23** (1988) 231-238; (その 2), *同* **23** (1988) 315-321; (その 3), *同* **24** (1989) 81-93: 鈴木 増雄, 量子統計力学系のモンテカルロ法, 「計算物理学と計算化学 — 分子動力学とモンテカルロ法 —」 286-304 頁, 田中 実・山本 良一 編 (海文堂, 1988 年) .
- [4] M. Suzuki, ed., *Quantum Monte Carlo Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Systems*, Solid-State Sciences **74** (Springer, Berlin, Heidelberg, 1987).
- [5] M. Suzuki, Generalized Trotter's Formula and Systematic Approximants of Exponential Operators and Inner Derivations with Applications to Many-Body Problems, *Commun. Math. Phys.* **51** (1976) 183-190; On the Convergence of Exponential Operators — the Zassenhaus Formula, BCH Formula and Systematic Approximations, *ibid.* **57** (1977) 193-200; Transfer-Matrix Method and Monte Carlo Simulation in Quantum Spin Systems, *Phys. Rev. B* **31** (1985) 2957-2965; Decomposition Formulas of Exponential Operators and Lie Exponentials with Some Applications to Quantum Mechanics and Statistical Physics, *J. Math. Phys.* **26** (1985) 601-612; General Correction Theorems on Decomposition Formulae of Exponential Operators and Extrapolation Methods for Quantum Monte Carlo Simulations, *Phys. Lett. A* **113** (1985) 299-300.
- [6] M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, Monte Carlo Simulation of Quantum Spin Systems, *Prog. Theor. Phys.* **58** (1977) 1377-1387.
- [7] H. De Raedt and A. Lagendijk, Monte Carlo Calculation of the Thermodynamic Properties of a Quantum Model: A One-Dimensional Fermion Lattice Model, *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981) 77-80.
- [8] J.E. Hirsch, R.L. Sugar, D.J. Scalapino and R. Blankenbecler, Efficient Monte Carlo Procedure for Systems with Fermions, *Phys. Rev. Lett.* **47** (1981) 1628-1631; Monte Carlo Simulation of One-Dimensional Fermion Systems, *Phys. Rev. B* **26** (1982) 5033-5055.
- [9] M. Suzuki, Relationship between d -Dimensional Quantum Spin Systems and $(d + 1)$ -Dimensional Ising Systems — Equivalence, Critical Exponents and Systematic Approximants of the Partition Function and Spin Correlations —, *Prog. Theor. Phys.* **56** (1976) 1454-1469; Classical Representation and Scaling Property of the Kondo, Hubbard and Anderson Hamiltonians, and Quantal Random Systems, *ibid.* **58** (1977) 755-766.

- [10] J.E. Hirsch and D.J. Scalapino, $2p_F$ and $4p_F$ Instabilities in a One-Quarter-Filled-Band Hubbard Model, *Phys. Rev. B* **27** (1983) 7169-7185; $2p_F$ and $4p_F$ Instabilities in the One-Dimensional Hubbard Model, *ibid.* **29** (1984) 5554-5561; J.E. Hirsch, Charge-Density-Wave to Spin-Density-Wave Transition in the Extended Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 2327-2330.
- [11] I. Morgenstern and D. Würtz, Monte Carlo Simulations for Two-Dimensional Quantum Systems, *Z. Phys. B* **70** (1988) 115-120; I. Morgenstern, Monte-Carlo Algorithm for a Two-Dimensional Hubbard Model of High- T_c Superconductivity, *ibid.* **70** (1988) 291-207; Quantum-Monte-Carlo Simulations for Fermionic Systems, *ibid.* **77** (1989) 267-273.
- [12] 今田 正俊, 宮下 精二, 量子モンテカルロ法 (その 4), 固体物理 **24** (1989) 746-754.
- [13] H. De Raedt and W. von der Linden, Quantum Lattice Problems, to appear in "The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics", ed. K. Binder (Springer, Berlin).
- [14] R.L. Stratonovich, On a Method of Calculating Quantum Distribution Functions, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* **115** (1957) 1097 [translation, *Soviet Phys. Doklady* **2** (1958) 416-419]; J. Hubbard, Calculation of Partition Functions, *Phys. Rev. Lett.* **3** (1959) 77-78.
- [15] J.E. Hirsch, Discrete Hubbard-Stratonovich Transformation for Fermion Lattice Models, *Phys. Rev. B* **28** (1983) 4059-4061.
- [16] J.E. Hirsch, Monte Carlo Study of the Two-Dimensional Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.* **51** (1983) 1900-1903; Two-Dimensional Hubbard Model: Numerical Simulation Study, *Phys. Rev. B* **31** (1985) 4403-4419.
- [17] J.E. Hirsch, Connection between World-Line and Determinantal Functional-Integral Formulations of the Hubbard Model, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 3216-3220.
- [18] R.T. Scalettar, E.Y. Loh, J.E. Gubernatis, A. Moreo, S.R. White, D.J. Scalapino, R.L. Sugar and E. Dagotto, Phase Diagram of the Two-Dimensional Negative- U Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 1407-1410, Errata, *ibid.* **63** (1989) 218; A. Moreo and D.J. Scalapino Two-Dimensional Negative- U Hubbard Model, *ibid.* **66** (1991) 946-948.
- [19] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino and R.L. Sugar, Monte Carlo Calculations of Coupled Boson-Fermion Systems. I, *Phys. Rev. D* **24** (1981) 2278-2285; D.J. Scalapino and R.L. Sugar, Monte Carlo Calculations of Coupled Boson-Fermion Systems. II, *Phys. Rev. B* **24** (1981) 4295-4308.
- [20] J.E. Hirsch, Stable Monte Carlo Algorithm for Fermion Lattice Systems at Low Temperatures, *Phys. Rev. B* **38** (1988) 12023-12026.
- [21] G. Sugiyama and S.E. Koonin, Auxiliary Field Monte-Carlo for Quantum Many-Body Ground States, *Annals of Phys.* **168** (1986) 1-26.
- [22] J.E. Hirsch, Simulations of the Three-Dimensional Hubbard Model: Half-Filled Band Sector, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 1851-1859.

- [23] S. Sorella, E. Tosatti, S. Baroni, R. Car and M. Parrinello, Numerical Simulation of 1D and 2D Hubbard Models: Fermi Liquid Behavior and Its Breakdown, *Int. J. Mod. Phys. B2* (1988) 993-1003: S. Sorella, S. Baroni, R. Car and M. Parrinello, Novel Technique for Simulation of Interacting Fermion Systems, *Europhys. Lett.* **8** (1989) 663-668.
- [24] S.R. White, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, E.Y. Loh, J.E. Gubernatis and R.T. Scalettar, Numerical Study of the Two-Dimensional Hubbard Model, *Phys. Rev. B* **40** (1989) 506-516.
- [25] M. Imada and Y. Hatsugai, Numerical Studies on the Hubbard Model and the t - J Model in One- and Two-Dimensions, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** (1989) 3752-3780.
- [26] E.Y. Loh Jr., J.E. Gubernatis, R.T. Scalettar, S.R. White, D.J. Scalapino and R.L. Sugar, Sign Problem in the Numerical Simulation of Many-Electron Systems, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 9301-9307: D.R. Hamann and S.B. Fahy, Energy Measurement in Auxiliary-Field Many-Electron Calculations, *ibid.* **41** (1990) 11352-11363.
- [27] N. Furukawa and M. Imada, Minus Sign Problem in the Monte Carlo Simulation of Lattice Fermion Systems, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60** (1991) 810.
- [28] N. Hatano and M. Suzuki, Transfer-Matrix Calculations of the Spin 1/2 Antiferromagnetic XXZ Model on the 4×2 Triangular Lattice Using the Fractal Decomposition, *Prog. Theor. Phys.* **85** (1991) 481-491.
- [29] K.A. Chao, J. Spalek and A.M. Oleś, Kinetic Exchange Interaction in a Narrow S-Band, *J. Phys. C* **10** (1977) L271-L286.
- [30] G. Baskaran, Z. Zou and P.W. Anderson, The Resonating Valence Bond State and High- T_c Superconductivity – A Mean Field Approach, *Solid State Commun.* **63** (1987) 973-976: F.C. Zhang, C. Gros, T.M. Rice and H. Shiba, A Renormalised Hamiltonian Approach to a Resonant Valence Bond Wavefunction, *Supercond. Sci. Technol.* **1** (1988) 36-46.
- [31] C.L. Cleveland and R. Medina, Obtaining a Heisenberg Hamiltonian from the Hubbard Model, *Am. J. Phys.* **44** (1976) 44-46.
- [32] X.Y. Zhang, E. Abrahams and G. Kotliar, Quantum Monte Carlo Algorithm for Constrained Fermions: Application to the Infinite- U Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991) 1236-1239.
- [33] J.E. Hirsch, Attractive Interaction and Pairing in Fermion Systems with Strong On-Site Repulsion, *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 1317-1320: P.W. Anderson, The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity, *Science* **235** (1987) 1196-1198.
- [34] 古川 信夫, 私信.