

## クラスタモンテカルロ法の最近の進展

東京都立大学 大学院理学研究科 川島 直輝<sup>1</sup>

1993年ころから量子スピン系のためのクラスタアルゴリズムが急速に進展した。この数年に限っても、一般論としては、連続時間への拡張、非対角物理量の計算法などが提案され、個別の問題に関しては、スピンレスフェルミオン系など一部の問題に関する負符号問題の解決や、その他これまで応用されてこなかったモデルに対するさまざまな拡張が試みられている。本講演ではそれらのなかから重要と思われるもののいくつかをとりあげて紹介する。

### 1 初期の問題点

1993年に Evertz, Lana, Marcu[1] が提案したクラスタアルゴリズムはそれ以前からよく知られていた Ising モデルに対する Swendsen-Wang[2] アルゴリズムの考え方にそった6バーテックスモデルのためのアルゴリズムである。 $S = 1/2$  量子  $XXZ$  スピンモデルを鈴木 - Trotter 公式で古典モデルに変換すると6バーテックスモデルが得られるから、このアルゴリズムは  $XXZ$  モデルの世界線モンテカルロ法にただちに適用できる [3]。その後、イジング的異方性の強い極限でクラスタアルゴリズムが Swendsen-Wang アルゴリズムに一致することが指摘され [4]、このアルゴリズムがより強い意味で Swendsen-Wang アルゴリズムの量子スピン系への拡張になっていることが分かった。Swendsen-Wang アルゴリズムが Ising モデルのシミュレーションにおける臨界緩和を劇的に抑えることはすでに知られていたので、このことだけからも、クラスタアルゴリズムが量子モンテカルロ法を大幅に加速する可能性があることがわかる。これはクラスタアルゴリズムを  $S > 1/2$  の場合にも拡張したものに対しての実際のシミュレーションでも確かめられた [5]。拡張はさらにより対称性の低い  $XYZ$  モデルに関してもなされ [6]、スピン系のモデルとしてかなり広い範囲をカバーするものになった。また、一部のフェルミ粒子モデルは反交換関係からくる符号を除いてスピンモデルと等価になるので、それらのモデルに対するクラスタアルゴリズムも得られていることになる。また、クラスタアルゴリズムは単にシミュレーションを加速するだけでなく、それ以前のアルゴリズムにあったエルゴード性の問題を自然と解決するようにできている。エルゴード性の問題を回避するために、それまでは種々のクラスタフリップが便宜的に導入されていたが、クラスタ形状が状態と無関係にあらかじめ固定されていた。そのため、これらのクラスタによる状態更新がシミュレーションの加速には役立たず、むしろ、シミュレーションの低速化の原因となることが知られていた。更に、同時にプログラミングの作業を場合によっては手におえないほど複雑なものにしていた。これらの問題もクラスタアルゴリズムによって解決されたことになる。

---

<sup>1</sup> E-mail: nao@phys.metro-u.ac.jp

しかし、クラスタアルゴリズムが用いられるようになった時点でも世界線モンテカルロシミュレーションはさまざまな解決すべき問題点があった。これらを列挙すると

1. 経路積分離散化に伴う系統誤差を抑えるために工夫が必要であること。
2. モンテカルロ法に用いられる基底の取り方において非対角行列で表されるような演算子の相関関数が計算できない、あるいは計算するのに多大の計算量が必要。
3. 負符号問題。
4. スピン間相互作用と外場とが競合するとき緩和時間が逆温度の関数として、指数関数的に増大する。

これらの問題のうち、1 番目の経路積分離散化の問題は連続時間に基づくアルゴリズムを考えることによって解決することがわかった [7]。2 番目の非対角演算子の問題は通常はスピンの言葉で定義されるこれらの演算子をグラフで表すことによって解決することがわかった [8]。3 番目の問題については、スピンレスフェルミオン系など特別な場合には限られた状態空間内のマルコフ過程を考えることで、解決することがわかった。この限られた状態空間でのモンテカルロ法によって、最後の 4 番目の問題もある場合には解決することがわかった。以下ではこれらについて簡単に紹介する。

## 1.1 連続時間への拡張

局所更新にもとづいたアルゴリズムでは、経路積分を離散化する定式化にもとづいていたために、通常のモンテカルロシミュレーションに現れる統計誤差の他、積分の離散化からくる系統誤差も評価しなければならなかった。これに加えて、一度の更新で発生する変化の虚数時間方向のスケールが離散化の時間幅に等しいために、系統誤差を抑えようとして時間幅を小さくすると、この人工的な時間スケールと物理的に意味のある時間スケール（これは当然離散化時間幅のとりかたにはよらない）の間に大きな隔たりが生じ、結果として計算上の緩和時間が大きくなってしまふ。これは数値計算の観点からすると、臨界緩和とよく似た状況であるといえる。というのは、臨界緩和の際には更新 1 ステップの間に生ずる状態変化の空間方向のスケールと物理的相関長との解離が緩和時間の増大の原因であり、空間の役割と時間の役割を入れ換えるとちょうど対応がつくからである。クラスタアルゴリズムによって生成されるクラスタは空間方向だけでなく時間方向にも物理的なスケールを反映するから、人為的な離散化幅の取り方に影響を受けない。したがって、離散化幅を小さくしたときの困難はクラスタアルゴリズムの導入によって解消される [5]。別の表現をすると、局所更新アルゴリズムの場合と異なり、クラスタアルゴリズムのダイナミクスは、離散化幅が物理的な相関時間に比べて小さくとられる限りにおいて、シミュレートされる物理系の性質だけによっていて、離散化幅の取り方とは無関係である。

しかし、離散化からくる系統誤差の問題は残っていた。この問題が実は完全に解消できることを指摘したのは Beard と Wiese [7] だった。彼らの示した方法は少なくとも考え方の上では極め

て単純であり、離散時間に対して既に知られていたクラスタアルゴリズムが離散化幅をどんどん小さくしていったときに、どのようなものに近付いていくかを想像しさえすれば思い至ることのできるものである。ある有限の時間幅  $\tau$  をもつ区間  $I$  を離散化幅  $\Delta\tau$  で分割してできた多数の微小区間を考える。それまでの離散時間上でのクラスタアルゴリズムにおいては、微小区間のうち任意の1つにたいして特定の種類のグラフ要素  $G$  を割り当てる確率  $\Delta P(G)$  は、微小区間の長さ  $\Delta\tau$  に比例した形をもち、 $\Delta\tau$  について最低次までとると

$$\Delta P(G) = a(G)\Delta\tau$$

と書けた。時間離散化幅を小さくしていくと、この確率によるグラフ要素の割り当て操作は、区間  $I$  全体に一樣な確率密度  $a(G)$  でグラフ要素  $G$  を割り当てる操作に等価になることは自明である。一樣な確率密度によるグラフ要素の配置は、原子核崩壊過程のようなポアソン過程を数値的に実現することによって生成することができる。この考察からただちに連続時間上のクラスタアルゴリズムが得られる。つまり、もし離散時間上でクラスタアルゴリズムが存在するなら、常にその連続時間極限を考えることで連続時間アルゴリズムが得られることが分かる。世界線モンテカルロ法の提案以来、量子モンテカルロ法につきまっていた離散化誤差からは完全に解放されたことになる。

## 1.2 非対角グリーン関数の計算法

電子系のモデルにおける超伝導相関関数や、スピン系のモデルにおける横成分 ( $S_z$  を対角化する表示を用いた場合の  $S_x, S_y$ ) 相関関数など、非対角行列で表される物理量の相関関数を効率的に計算する方法は、クラスタアルゴリズム以前には知られていなかった。これらの物理量はクラスタアルゴリズムにおける物理量のグラフ表現を用いることによって他の物理量と同様に効率的に計算することができることが最近になって分かった [8]。

$A, B$  を任意の物理量を表す演算子として、

$$\langle B(\tau')A(\tau) \rangle \quad (\tau < \tau') \quad (1)$$

を考える。クラスタアルゴリズムに特徴的であるグラフ変数を導入した分配関数の表示 [2, 4] によれば、

$$Z = \sum_{S, G} V(G) \Delta(S, G) = \sum_G V(G) 2^{N_c(G)}$$

と書ける。ここで、 $S, G$  はそれぞれ全時空を定義域とする関数としての状態とグラフ、 $\Delta(S, G)$  は状態  $S$  がグラフ  $G$  と矛盾していないときに1となり、そうでなければ0になる関数、 $N_c(G)$  はグラフ  $G$  に含まれるクラスタの個数である。 $V(G)$  はグラフの重みで、 $G$  に関する和をさきにとったとき、もともとのボルツマン重み  $W(S)$  が得られるようにとられる。これと同様に上記の相関関数 (1) を考えると、 $A$  の行列要素を  $A(S', S) \equiv \langle S' | A | S \rangle$  などと書くことにして、

$$\begin{aligned} \langle B(\tau')A(\tau) \rangle = & \frac{\sum_{S, G} V(G) \Delta(S_{II}, G_{II}) B(S(\tau' + 0), S(\tau' - 0)) \Delta(S_I, G_I) A(S(\tau + 0), S(\tau - 0))}{\sum_{S, G} V(G) \Delta(S, G)} \quad (2) \end{aligned}$$

と表せる。ここで、 $S_I, S_{II}$  は  $S$  を虚数時間に関する定義域によって2つの部分にわけたものであり ( $S_I, S_{II}$  はそれぞれ  $S$  の領域  $I, II$  への制限), 定義域はそれぞれ区間  $I \equiv (\tau, \tau')$ , 区間  $II \equiv [0, \beta) - (\tau, \tau')$  である。  $S_I$  の「初期条件」は時刻  $\tau+0$  における状態  $S(\tau+0)$ , 「終条件」は時刻  $\tau'-0$  における状態  $S(\tau'-0)$  で与えられる。間に演算子  $A, B$  が入ることから, 時刻  $\tau, \tau'$  の2点については一般には状態に連続性がなくてもよい。つまり, たとえば  $S(\tau-0) \neq S(\tau+0)$  であるような状態  $S$  も相関関数に有限の寄与を与えうる。通常興味のある場合の多くにおいて,  $A, B$  は少数の局所的な演算子の積または和である。このような場合, 相関関数は簡単なグラフ表現を持つ。

例として,  $S = 1/2$  のハイゼンベルクモデルを考える。  $S_z$  が対角化されているとして,  $A = S_i^x, B = S_j^x$  を考えると,  $A$  は空間位置  $i$  でのスピンの向きを反転させるだけの演算子であり,  $B$  は空間位置  $j$  に対して同じことをする演算子である。このとき, (2) のある時空状態  $S = S_I \oplus S_{II}$  とグラフ  $G$  の組合せが分子に対して0でない寄与を与えるとすると, 2つの時空点  $(i, \tau)$  と  $(j, \tau')$  は  $G$  において同一のクラスタ (この場合は閉じたループになる) に属していなければならない。なぜなら, もし同一のループに属していないとして,  $(i, \tau)$  だけが含まれ,  $(j, \tau')$  が含まれないループを考えると, そのループ上では1箇所においてのみ局所的な状態が通常のループの上とは違った変化の仕方をするようになる。たとえば, 強磁性ハイゼンベルクモデルなら通常のループ上ではスピンの符号は変化しないが, いま考えているループでは  $(i, \tau)$  を通過するとスピンの符号が変化する。しかし, その様な変化はスピンの符号がループを一周すると, もとの状態に戻ることに反する。2回「異常」な変化をすることではじめてもとに戻ることができる。すなわち, 相関関数の表式の分子において, 有限の寄与を与えるのは2時空点が同一ループ上にのっているようなグラフのみである。逆に2時空点が同一ループに属するようなグラフのもとでは, (2) の分子に有限の寄与を与えるような状態と分母に有限の寄与を与える状態は単にループ上の2時空点間のスピン状態を反転することで1対1対応がつくので, そのようなグラフが常に分子に有限の寄与を与えることは明らかである。したがって, この相関関数のグラフ表現としては2時空点がグラフ上で連結されているかどうかを表す関数  $\chi_{(i, \tau), (j, \tau')}(G)$  を考えればよい, ということになる。

### 1.3 負符号問題

以上に加えて, クラスタアルゴリズムにおける物理量のグラフ表現は特殊な場合には負符号問題の解消にも役立つことが分かった [9, 10]。たとえば, 最隣接格子点間に斥力のあるスピンレスフェルミオンの問題

$$H = -t \sum_{(ij)} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) + V \sum_{(ij)} \left( n_i - \frac{1}{2} \right) \left( n_j - \frac{1}{2} \right) \quad (3)$$

を考える。このモデルは,  $0 < 2t < V$  であれば, 符号を除いてはイジング的な異方性のある反強磁性ハイゼンベルクモデルと等価であり, フェルミオン反交換関係からくる符号は簡単なグラフ表現を持つ。すなわち, ループが符号付きのものと符号なしのものに分類され, 符号付きのものが1つでも含まれるようなグラフは状態和に寄与しない。ここで符号付きのループとはそれを反

転すると全体の符号が変化するようなループである。より具体的には、例えば、時間方向の巻き数0のループであれば、ループを空間方向に投影したものの長さが  $4n$  であるとき、そのループを反転することによって、 $2n$  個のフェルミオンが1つずつずれるので、これは奇置換となって、符号が変化する。よって、空間方向に長さが4の倍数であるループは符号付きループであるといえる。この場合には、ループが符号付きかどうかは他のループが仮に反転しても変わらない。つまり、個々のループが符号付きかどうかはスピン変数に関係なくそのループの形状だけ決まる。更に、(3)においては、符号付きループを持たないグラフに対して、そのグラフに適合する全ての時空状態に関するボルツマン重みの和をとったものが常に正になることが簡単に示される。したがって、グラフを発生させる際に符号付きループの生成を禁止してやると、発生するグラフは常に正で有限の寄与をもつことになるので負符号問題は起こらない。このような制限付きグラフ生成をどうやって詳細釣り合を破らない形で行うかが問題になる。これは個々の微小区間に対するグラフ要素割り当ての際に、そのグラフ要素を割り当てることで符号付きループが生成するかどうかを逐一調べることで解決される。すなわち、符号付きループが新たに生成しない様な場合にのみ割り当てを許可し、生成する場合には割り当てを行わないで次の微小区間に戻る、という手順である。ただし、実際には制限を厳しくすると緩和時間が長くなるので、符号付きループが0個の状態空間ではなく、0個または2個の状態空間で行うなどの工夫がされている。いずれにせよ、この手続きによって、スピンレスフェルミオン系に対しては負符号のでないシミュレーションが可能であることが分かった。ただし、一般モデルの場合には符号を各ループの符号の積という形で表せないし、仮に表せる場合であっても、符号付きループが存在しないことが重みが正であることの保証にはならないので、負符号問題は解決しない。そのため、この線に沿った負符号問題の解決はいまのところ非常に特殊な場合に限定されている。

#### 1.4 残された問題

以上、この数年に分かってきたことを中心にして、クラスタアルゴリズムの最近の進展を紹介した。方法論上残された重大な問題は第1に負符号問題、第2に強い外場がある場合などにみられる低温での指数関数的な緩和時間の増大である。後者は一様外場のもとにおかれた反強磁性ハイゼンベルクモデル [11] や結晶場異方性項を含むモデルなどにみられ、広い意味でのフラストレーションが存在する場合である。一様外場中の反強磁性ハイゼンベルクモデルでは磁場と交換相互作用が競合し、結晶場異方性項を含むモデルの場合には結晶場項と交換相互作用項が競合する。負符号問題も一般にフラストレーションのあるスピン系に現れるので、少なくともスピン系に関しては残された困難はほとんど何らかの意味でフラストレーションに起因するものであるといえる。もしかすると、フラストレーションに起因するこれらの指数関数的困難を解決する一般的手続きというものは存在しないのかも知れないが、いまのところそれは肯定も否定もされていない。

#### 参考文献

- [1] H. G. Evertz, G. Luna and M. Marcu, Phys. Rev. Lett. **70** (1993), 875.

- [2] R. H. Swendsen and J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 86.
- [3] U.-J. Wiese and H.-P. Ying, Phys. Lett. **A168** (1992), 143.
- [4] N. Kawashima and J. E. Gubernatis, Phys. Rev. E **51** (1995), 1547.
- [5] N. Kawashima and J. E. Gubernatis, Phys. Rev. Lett. **73** (1994), 1295.
- [6] N. Kawashima, J. Stat. Phys. **82** (1996), 131.
- [7] B. B. Beard and U. J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **77** (1996), 5130.
- [8] R. Brower, S. Chandrasekharan and U.-J. Wiese, Physica **A261** (1998), 520.
- [9] S. Chandrasekharan and U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **83** (1999), 3116.
- [10] J. Cox et al, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **83** (2000), 777.
- [11] この場合については、問題を負符号問題はあるが外場は存在しない場合にユニタリ変換してから、その負符号問題を上述の方法の応用で解消することによって解決する方法が提案されている。