

フェルミ粒子系の数値計算はなぜ難しい? : 負符号問題

フェルミ粒子の集団の基底状態・熱平衡状態を求めることは、あらゆる分野で遭遇する問題である。物性では強相関電子系の問題がその典型であり、原子核や量子色力学(QCD)の分野でも重要となる。当然ながら厳密に解こうとすると、すぐに困難に直面する。たとえば、 N 個の格子点上を動くフェルミ粒子系の基底状態を求める問題は、 N の指数関数に比例する次元の行列の固有値問題となるため、たとえ計算機が10倍速くなくても計算可能な格子点はたかだか数個しか増えない。ゆえに、何らかの「賢い」計算手法が必要である。その1つが量子モンテカルロ法である。

量子モンテカルロ法は、波動関数の振幅を確率と解釈し、和を厳密に評価する代わりに確率過程に置き換えて重要な寄与のみを足し上げる手法である。これは多くの物理系で有効な手法で、うまくいけば大きな系の数値計算が可能となる。しかし、フェルミ粒子系では、確率と解釈すべき量(確率重み)が負となる問題がしばしば生じる。これを「負符号問題」という。負符号問題が生じて、確率重みが正および負になる頻度 p_+ 、 p_- を集計し、それぞれで物理量の期待値 A_+ 、 A_- を求めておけば、 $A = (A_+p_+ - A_-p_-)/(p_+ - p_-)$ によって最終的な期待値 A を求めることができる。ところが、

格子点数 N が大きくなるにつれて、頻度 p_+ 、 p_- が拮抗するようになり、期待値の分子・分母がともに0に近づく。このとき、一定の精度で期待値を得るには、分母・分子を極めて高精度で求めなければならない、計算時間が N の指数関数に比例するようになる。つまり、「元の木阿弥」である!

負符号問題は量子モンテカルロ法が確立した当初から知られている根深い問題である。しかし、不思議な(困った)ことに物理的にももしろい現象が期待されるモデルでは、たいてい負符号問題が生じる。どうかしないといけない。まず、モデルに応じてアルゴリズムを改良し、確率が負になる頻度を減らす研究が地道に行われている。一方で、「なぜ数値計算が難しいのか?」を深く考察すると、新しい計算手法のヒントが得られる。最近になり、系全体にわたる「量子もつれ」が計算の困難さと深く関係していることがわかってきた。この知見をもとに、「テンソルネットワーク理論」とよばれる新しい数値計算手法が開発され、活発な研究が行われている。フェルミ粒子系の強力な数値計算手法はまだまだ必要とされており、斬新なアイデアによるブレイクスルーが強く望まれている。