

# 符号問題と世界体積ハイブリッドモンテカルロ法



福間 将文

京都大学大学院理学研究科  
fukuma@gauge.scphys.kyoto-u.ac.jp

ほとんどすべての物理系は解析的に解くことができない。そうした場合、**マルコフ連鎖モンテカルロ法**を用いた第一原理計算は極めて強力な手法である。この手法は、ユークリッド作用  $S(x)$  をもつ系において、配位  $x$  のボルツマン重率  $\rho(x) \equiv e^{-S(x)} / \int dx e^{-S(x)}$  が配位空間上の確率分布関数とみなせることに基礎をおいている。

しかしながら、作用  $S(x)$  が複素数値を取るときには、 $\rho(x)$  は複素数となり、もはや確率分布関数とみなすことができない。そうした場合の最も素朴なモンテカルロ法は、 $e^{-\text{Re} S(x)} / \int dx e^{-\text{Re} S(x)}$  を新しい確率分布とする再重み付け法で、ここでは位相因子  $e^{-i \text{Im} S(x)}$  を物理量の一部として扱う。

ところが、自由度が大きくなると、位相因子  $e^{-i \text{Im} S(x)}$  を含む経路積分は激しい振動積分となる。一般に、符号（より一般には位相因子）が激しく振動する量の期待値をモンテカルロ計算で評価する場合、統計誤差を相対的に小さくするには「自由度の指数関数」という膨大な計算時間がかかってしまう。こうした数値計算上の困難を**符号問題**と呼ぶ。符号問題をもつ重要な物理系としては、(1) 有限密度量子色力学 (QCD)、(2) 強相関電子系やフラストレートスピン系、(3) 量子多体系の実時間ダイナミクスなどがある。

符号問題の歴史は長く、これまで特定の問題ごとに個別の手法が進展してきたが、ここ10年ほどの間に符号問題の汎用的な解決法を探る動きが本格化した。その中で出てきたのが**レフシェッツ・シンプル法**である。この方法では、元の積分面を実空間から複素空間内に連続変形し、 $\text{Im} S = \text{const}$  となるような新しい積分面（レフシェツ

ツ・シンプル）上でモンテカルロ計算を行う。ところが、変形に伴って確かに積分の振動は緩和していくものの、今度は**エルゴード性の問題**が生じてしまう。実際、新しい積分面は通常複数のシンプルからなるが、異なるシンプル間には高さ無限大のポテンシャル障壁があるため、配位は新しい積分面上を自由に動くことができない。

レフシェッツ・シンプル法に内在するこの「符号問題の解消とエルゴード性の問題の発生」のジレンマを初めて同時解決したのが**焼き戻しレフシェッツ・シンプル法**である。ここでは、変形パラメータ自身も確率変数とみなす焼き戻し法が実装され、ポテンシャル障壁を回避する迂回路を用意することで、符号問題が解消している領域でのエルゴード性を保証する。

焼き戻しレフシェッツ・シンプル法の計算コストをさらに引き下げたのが**世界体積ハイブリッドモンテカルロ法**である。ここでは、変形途中の積分面を連続的に重ね合わせた領域（世界体積）上でハイブリッドモンテカルロ法を用いた計算を行う。

この世界体積ハイブリッドモンテカルロ法は、解析結果と比較できる場合に常に正しい結果を与えているアルゴリズムである。こうした汎用性と結果の信頼性および計算コストの点で、符号問題に対する現時点で最も強力な手法の一つである。しかしながら、まだ自由度の小さな系への適用が始まったばかりであり、今後は、富岳などで実際に大規模計算を行い、大自由度系に対してどこまでこのアルゴリズムで行けるか、そして大自由度系に向けて改良する点があるとすればどのような部分かを徹底的に突き詰めることが重要である。

## 用語解説

### マルコフ連鎖モンテカルロ法：

ある確率分布に対する期待値を「マルコフ確率過程により生成された配位のサンプル平均」を用いて評価する方法。

### 符号問題：

符号（一般には位相因子）が激しく振動する量の期待値をモンテカルロ法を用いて数値的に評価する際、統計誤差を相対的に小さくするには「自由度の指数関数」という膨大な計算コストがかかる問題。典型的には、本解説で扱われているような複素作用をもつ大自由度系のモンテカルロ計算で現れる。

### レフシェッツ・シンプル法：

振動積分とならないように積分面を複素空間内に変形し、そこでモンテカルロ計算を行う方法。コーシーの定理より、積分結果は変わらないことが保証される。

### エルゴード性の問題：

ある確率過程において、配位が配位空間を十分に動き回れない問題。とくにマルコフ連鎖モンテカルロ法では、配位空間に大きなポテンシャル障壁が存在するときに生じる。

### 焼き戻しレフシェッツ・シンプル法：

符号問題とエルゴード性の問題の間のジレンマを、変形パラメータによる焼き戻しを用いて解決する手法。

### 世界体積ハイブリッドモンテカルロ法：

焼き戻しレフシェッツ・シンプル法の発展版。引き続き符号問題とエルゴード性の問題を同時解決しながら、計算コストが一気に低下。