

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 9 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540438

研究課題名(和文)マルコフ連鎖モンテカルロにおける幾何学的手法の研究

研究課題名(英文)Geometric Approach to Markov Chain Monte Carlo

研究代表者

藤堂 眞治 (Todo, Syngé)

東京大学・理学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：10291337

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円、(間接経費) 1,170,000円

研究成果の概要(和文)：強相関多体系に対する最も強力なシミュレーション手法の一つであるマルコフ連鎖モンテカルロ法に、「埋め立て法」などの幾何学的手法を応用し、収束を劇的に改善する一般的な方法を見出した。さらに、エネルギーギャップの精密測定法、量子モンテカルロレベルスペクトロスコピー法、局所Z_Nベリー位相の測定法、相互作用の非等方性が強い系に対する有効な有限サイズスケーリング法の開発を行った。また、「埋め立て法」のための汎用ライブラリBCLとそれを応用した量子モンテカルロ法アプリケーションWormsを開発し、インターネット上で公開した。

研究成果の概要(英文)：We have applied geometric approaches, such as the landfilling method, to the Markov chain Monte Carlo method, which is one of the most powerful method to strongly correlated many-body systems, and found a generic method that drastically accelerates the convergence of Markov chain. We have also developed a precise estimator of energy gap, quantum Monte Carlo level spectroscopy, method for calculating the local Z_N Berry phase, new finite size scaling method for systems with strong spatial anisotropy. In addition, we have developed and made public the BCL library - the generic library for the landfilling method, and the Worms Package - the quantum Monte Carlo application based on the BCL library.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学、数理物理・物性基礎

キーワード：計算物理 モンテカルロ法 アルゴリズム 磁性 統計物理 物性基礎論

1. 研究開始当初の背景

マルコフ連鎖モンテカルロ法は、統計物理・物性物理にとどまらず、素粒子物理、原子核物理、生物物理、化学、統計、金融、医学など、現在さまざまな分野で必要不可欠な数値解析手法となっている。モンテカルロ法は、確率過程を用いて任意の標的確率分布に従う状態変数を生成する方法であるが、その遷移確率は2つの条件を満たさなければならない。ひとつは「つりあい条件(BC)」、もうひとつの条件は「エルゴード性」である。BCは標的分布が不変分布となる条件である。一方エルゴード性は、不変分布が初期状態によらず一意的であることを保証する。

しかし実際には、現実的な時間で推定値が収束しないと使い物にはならない。マルコフ連鎖中の統計的に独立なサンプルの数は、自己相関時間 --- 現在の状態を忘れるのに必要なおおよその時間 --- に反比例する。すなわち、自己相関時間が長いほど推定値の分散が大きくなる。より効率的なモンテカルロ法を実現するには、以下の3つの点を改善する必要がある。1つ目は、標的分布の選択である。マルチカノニカル法や交換法といった拡張アンサンブル法は、この観点からの改良と言える。2つ目は、遷移先となる状態候補の選び方である。クラスターアルゴリズムが使える場合は、小さい棄却率で大域的な状態更新が可能となる。3つ目は、状態候補の組が与えられたときの遷移確率の選び方である。

2. 研究の目的

本研究の目的は、マルコフ連鎖モンテカルロ法の基本原理を見直し、さらに高速かつ効率的なアルゴリズムを開発することにある。本研究では、イジング模型などの離散状態変数の場合に成功した「確率の埋め立て」の手法を連続状態変数に拡張し、棄却のない汎用の確率更新法を確立する。また、我々のアプローチは、モンテカルロ法の基本原理に関するものである。近年発達してきた他の様々なモンテカルロアルゴリズム --- 拡張アンサンブル法やクラスターアルゴリズムなど --- と組み合わせて使うことも原理的に可能である。本研究では、ハイブリッド法、スライスサンプリング、交換法、マルチカノニカル法、Wang-Landau法、向き付きループ量子モンテカルロ法、などあらゆる既存のモンテカルロ法との組み合わせを検討し、その効果を検証する。さらに、その応用として、量子スピン系における新奇な量子相の解明に取り組む。

また、我々は汎用シミュレーションソフトウェアの開発・公開にも力を入れてこれまで研究を進めてきた。本研究で得られる新しいモンテカルロアルゴリズムを、計算統計物理の枠を越えた汎用のソフトウェアとして開発・公開しておくことも本研究の大きな目標

の一つである。

3. 研究の方法

本研究「マルコフ連鎖モンテカルロにおける幾何学的手法の研究」は、以下の4つのテーマからなる。

1. 幾何学的手法に基づく新しいモンテカルロアルゴリズムの開発とその一般化
2. 既存のモンテカルロ法との組み合わせ手法の探求とその効果の検証
3. 量スピン系への応用研究
4. ライブラリの整備と公開

平成23年度はテーマ1と2について重点的に研究を進めた。平成24年度以降は、テーマ1と2を引き続き進めると同時に、その成果を元にテーマ3と4の研究を行った。

4. 研究成果

我々の「埋め立て法」では、1)詳細釣り合いを明示的に破り、2)棄却率を最小化する。今年度はこれを拡張し、詳細釣り合いを満たしつつも棄却率を最小化するアルゴリズムを開発し、ポッツ模型の局所更新法に用いた場合、従来の埋め立て法と同程度に有効であることを示した。このアルゴリズムは、ダイナミクスなど詳細釣り合いの有無が影響する場合に特に有用である。

また、「埋め立て法」の連続系への応用を行った。従来の熱浴法を拡張するだけでなく、分子動力学法を用いたハイブリッド法を組み合わせることにより、従来の方法に比べ、数倍~10倍程度効率良くサンプリングが行えることを示した。

加えて、「埋め立て法」にもとづく「棄却なし向き付きフープ量子モンテカルロ法」のプログラムを作成し、従来の方法では緩和が遅くシミュレーションが困難であったスピンパイエルス系の量子相転移現象を調べ、2次元における「スピン液体」状態の存在の可能性を示した。

他にも、量子モンテカルロ法によるエネルギーギャップの精密測定法、量子モンテカルロ法により求めたエネルギー準位の交差により相転移点を精度よく求める「量子モンテカルロレベルスペクトロスコピー法」の開発とスピンパイエルス系の相転移への応用、トポロジカルな秩序変数として期待されている局所 Z_N ベリリー位相の量子モンテカルロによる測定法の開発、相互作用の非等方性が強い系に対する有効な有限サイズスケールリング法の開発と非等方性起源の有限サイズスケールリングへの強い補正の起源の解明などを行っている。

さらに、「埋め立て法」のための汎用ライブラリ BCL (Balance Condition Library)、量子モンテカルロアプリケーション Worms を開発し、それぞれインターネット上で公開した。

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 13 件)

(1) Yuichi Motoyama, Synge Todo, Path-Integral Monte Carlo for the Gauge-Fixed Berry Connection and the Local Z₂ Berry Phase, JPS Conf. Proc. 1, 012130 (2014) 査読有.

DOI: 10.7566/JSPSC.1.012130

(2) Shinya Yasuda, Synge Todo, Numerical Analysis of Quantum Phase Transitions with Dynamic Control of Anisotropy, JPS Conf. Proc. 1, 012127 (2014) 査読有.

DOI: 10.7566/JSPSC.1.012127

(3) Akiko Masaki, Takafumi Suzuki, Kenji Harada, Synge Todo, Naoki Kawashima, Parallelized Quantum Monte Carlo Algorithm with Nonlocal Worm Updates, Phys. Rev. Lett. 112, 140603 (2014) 査読有.

DOI:10.1103/PhysRevLett.112.140603

(4) 諏訪秀磨, 藤堂眞治, 「詳細つりあいを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法とその一般化」, 数理解析研究所 講究録 1848, 93-107 (2013) 査読無.

<http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/1848.html>

(5) Synge Todo, Hidemaro Suwa, Geometric Allocation Approaches in Markov Chain Monte Carlo, J. Phys.: Conf. Ser. 473, 012013 (2013) 査読有.

DOI: 10.1088/1742-6596/473/1/012013

(6) Shinya Yasuda, Synge Todo, Monte Carlo simulation with aspect ratio optimization: Anomalous anisotropic scaling in dimerized antiferromagnet, Phys. Rev. E 88, 061301(R) (2013) 査読有.

DOI: 10.1103/PhysRevE.88.061301

(7) Kenji Harada, Takafumi Suzuki, Tsuyoshi Okubo, Haruhiko Matsuo, Jie Lou, Hiroshi Watanabe, Synge Todo, Naoki Kawashima, Possibility of Deconfined Criticality in SU(N) Heisenberg Models at Small N, Phys. Rev. B 88, 220408(R) (2013) 査読有.

DOI: 10.1103/PhysRevB.88.220408

(8) H. Nakano, S. Todo, T. Sakai, Long-Range Order of the Three-Sublattice Structure in the S=1 Heisenberg Antiferromagnet on the Spatially Anisotropic Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 043715 (2013) 査読有.

DOI: 10.7566/JPSJ.82.043715

(9) Yuichi Motoyama, Synge Todo, Path-integral Monte Carlo method for the local Z₂ Berry phase, Phys. Rev. E 87, 021301(R) (2013) 査読有.

DOI: 10.1103/PhysRevE.87.021301

(10) Hidemaro Suwa, Synge Todo, Geometric allocation approach for transition kernel of Markov chain, in Monte Carlo Methods and

Applications (proceedings of Eighth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods), ed. K. K. Sabelfeld, I. Dimov, pp.213-222 (De Gruyter, Berlin, 2012) 査読有.

<http://www.degruyter.com/view/product/184575>

(11) J. Nasu, S. Todo, S. Ishihara, Ordering and Excitation in Orbital Compass Model on a Checkerboard Lattice, Phys. Rev. B 85, 205141 (2012) 査読有.

DOI: 10.1103/PhysRevB.85.205141

(12) T. Nakada, T. Mori, S. Miyashita, M. Nishino, S. Todo, W. Nicolazzi, P. A. Rikvold, Critical temperature and correlation length of an elastic interaction model for spin-crossover materials, Phys. Rev. B 85, 054408 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevB.85.054408 査読有.

(13) B. Bauer, L. D. Carr, A. Feiguin, J. Freire, S. Fuchs, L. Gamper, J. Gukelberger, E. Gull, S. Guertler, A. Hehn, R. Igarashi, S.V. Isakov, D. Koop, P.N. Ma, P. Mates, H. Matsuo, O. Parcollet, G. Pawłowski, J.D. Picon, L. Pollet, E. Santos, V.W. Scarola, U. Schollwoeck, C. Silva, B. Surer, S. Todo, S. Trebst, M. Troyer, M.L. Wall, P. Werner, S. Wessel, The ALPS project release 2.0: Open source software for strongly correlated systems, J. Stat. Mech. P05001 (2011) 査読有.

DOI: 10.1088/1742-5468/2011/05/P05001

〔学会発表〕(計 16 件)

(1) 藤堂眞治, 「マルコフ連鎖と量子モンテカルロ」, 統計力学の最近の展開 (2014年3月3日, 東大).

(2) Synge Todo, Quantum Phase Transition and Universality of Quantum Spin Models with Strong Spatial Anisotropy, Tappei Tensor Network Workshop 2013 (December 4, 2013, Taipei).

(3) Synge Todo, Geometric Allocation Approaches in Markov Chain Monte Carlo, ICSG2013 International Meeting on Inference, Computation, and Spin Glasses (July 28, 2013, Sapporo).

(4) Synge Todo, Hidemaro Suwa, Markov Chain Monte Carlo Sampling with Irreversible Kernel, STATPHYS25 XXV IUPAP International Conference on Statistical Physics (July 26, 2013, Seoul).

(5) Synge Todo, Large-scale Monte Carlo Study for Exotic Phase Transitions of Strongly Correlated Quantum Magnets, Collaborative Conference on Materials Research 2013 (June 26, 2013, Jeju).

(6) 藤堂眞治, 「次世代の計算物質科学に向けて」, 日本化学会第 93 春季年会 (2013年3月25日, 立命館大).

(7) 藤堂眞治, 「大規模並列量子モンテカル

口法 ALPS/looper と量子磁性体への応用」, スーパーコンピュータワークショップ 2013 (2013年1月23日, 分子研).

(8) Syngé Todo, Next-generation quantum Monte Carlo simulation of strongly correlated materials on peta-scale supercomputer, IEEE CPMT Symposium Japan 2012 (December 12, 2012, Kyoto).

(9) Syngé Todo, Quantum Monte Carlo level spectroscopy, CQDC'12 International Workshop on Cooperative Quantum Dynamics and Its Control (October 30, 2012, Jülich).

(10) Syngé Todo, The ALPS project: Open source software for strongly correlated systems, CCP2012: Conference on Computational Physics (October 17, 2012, Kobe).

(11) Syngé Todo, Quantum Monte Carlo level spectroscopy, Swiss-Japan Workshop 2012 Current Topics in Theory of Correlated Materials (September 12, 2012, Wako).

(12) 藤堂眞治, 「物性物理におけるモンテカルロ法とその大規模化」, PC クラスタワークショップ in 柏 (2012年7月6日, 東大柏).

(13) 藤堂眞治, 「量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象の探求」, 京コンピュータ・シンポジウム 2012 および第2回戦略プログラム 5分野合同 WS (2012年6月15日, 神戸).

(14) 藤堂眞治, 「大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper と量子磁性体への応用」, 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 シンポジウム (2012年3月6日, 神戸).

(15) Syngé Todo, Yuichi Motoyama, Topological order parameter in low-dimensional magnets - QMC measurement of local quantized Berry phase -, International Workshop on Simulation and Manipulation of Quantum Systems for Information Processing (October 18, 2011, Jülich).

(16) 藤堂眞治, 「モンテカルロ法の発展と量子磁性体への応用」, 計算物質科学研究センター第1回シンポジウム (2011年9月13日, 物性研)

〔図書〕(計1件)

(1) Syngé Todo, Loop Algorithm, in Strongly Correlated Systems: Numerical Methods (Springer Series in Solid-State Sciences), ed. A. Avella, F. Mancini, pp.~153--184 (Springer-Verlag, Berlin, 2013).

〔その他〕

ホームページ等

<http://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ja>

<http://alps.comp-phys.org>

<https://github.com/cmsi/bcl>

<https://github.com/wistaria/worms>

6 . 研究組織

(1) 研究代表者

藤堂 眞治 (Todo, Syngé)

東京大学・大学院理学系研究科・准教授

研究者番号 : 10291337