

ボソン系の量子計算に向けて

2023年10月11日 大阪大学南部陽一郎ホール

手塚真樹（京都大学理学研究科）

構成

- はじめに：ボソン系を扱う動機と、計算にあたっての問題
 - 固体物理：電子-フォノン相互作用系を例として
 - 行列模型：カットオフの導入
 - 空間の離散化：テンソルネットワークを用いた例
- 1次元調和振動子の量子力学の復習（ここから黒板か iPad）
- 離散化：有限自由度での取り扱い
- ボソン系の離散化の影響評価 [Hanada-Liu-Rinaldi-MT 2023]
 - 経路積分とモンテカルロ法、負符号問題について
 - 簡単な例：1個の調和振動子
 - もう少し複雑な例：空間2次元の自由スカラー場
- まとめ

Introduction

量子計算

- Rapid progress in device development
- さまざまな物理系の量子シミュレーション
- **有限個の量子ビット**(または qudit)、有限次元空間

ボソン自由度

- フォノン
- ボース統計に従う冷却原子気体
- 光量子と物質の相互作用: cavity QEDなど
- 非可換ゲージ理論
- **無限個の準位: カットオフ必要**



カットオフの効果:

ある場合には、符号問題のないモンテカルロ(古典計算)で評価可能

問い

- ボソン系を扱うために、連続自由度を離散化するが
- その影響を古典計算で評価できるか？

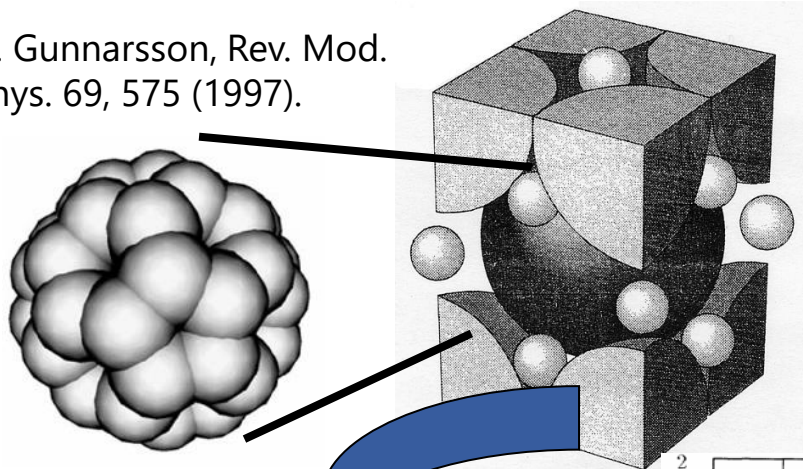
ボソン系を扱う動機(1) フォノン

- 固体中のフォノン：典型的に数十 meV （遅い）
 - 例：デバイ模型 $\omega = c|\mathbf{k}|$: $\omega_D^3 = 6\pi^2 n c^3$ \mathbf{k} : 波数 c : 音速 n : 原子密度
- 電子のバンド幅：典型的に数 eV （速い）
- 電子に比べてイオンが遅いとみる: Migdal 近似
- **成り立たない物質多数**
 - フォノンのエネルギースケールが大きい（硬い分子の変形等）
 - 電子のエネルギースケールが小さい（強相関物質, フラットバンド）
- 電子相関と、電子フォノン相互作用を対等に扱う必要

例: アルカリ ドープ フラーレン 超伝導体

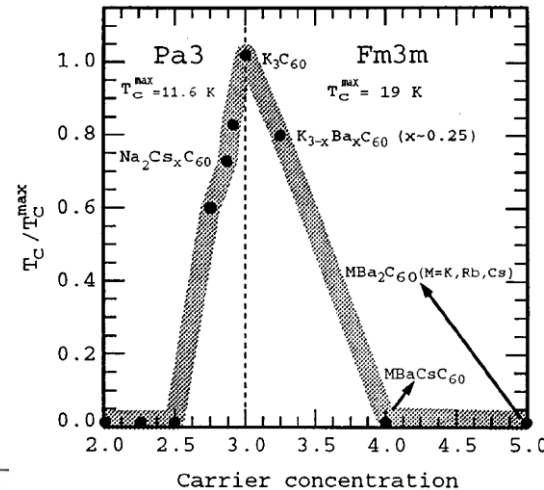
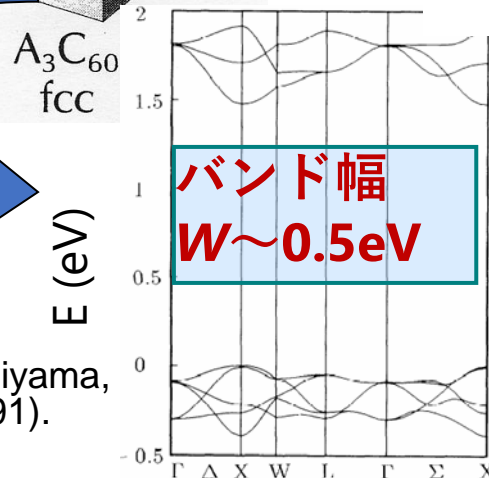
- K_3C_{60} (fcc; 18K) Hebard *et al*, Nature 1991
- $\text{RbCs}_2\text{C}_{60}$ (fcc; **33 K**) Tanigaki *et al*, Nature 1991
- Cs_3C_{60} (A15; **38 K** at 7 kbar) Ganin *et al*, Nature Materials 2008
- $(\text{NH}_3)_x\text{A}_3\text{C}_{60}$, Ca_5C_{60} , Sr_4C_{60} , Ba_4C_{60} , $\text{A}_3\text{Ba}_3\text{C}_{60}$, $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$, Sm_3C_{60} , ...

O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. 69, 575 (1997).



3重縮退した LUMO
→ 伝導帯

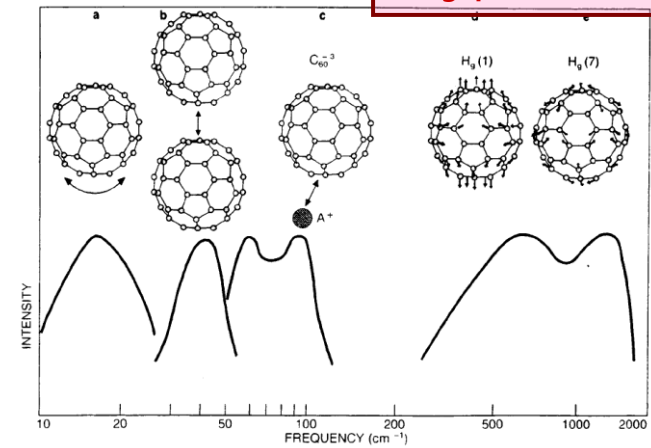
S. Saito and A. Oshiyama, PRL 66, 2637 (1991).



$n=3$ (half-filled)

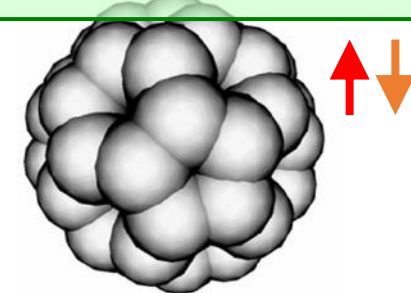
T. Yildirim *et al*, PRL 77, 167 (1996).

$\omega = 0.03 \sim 0.2 \text{ eV}$
(H_g phonons)

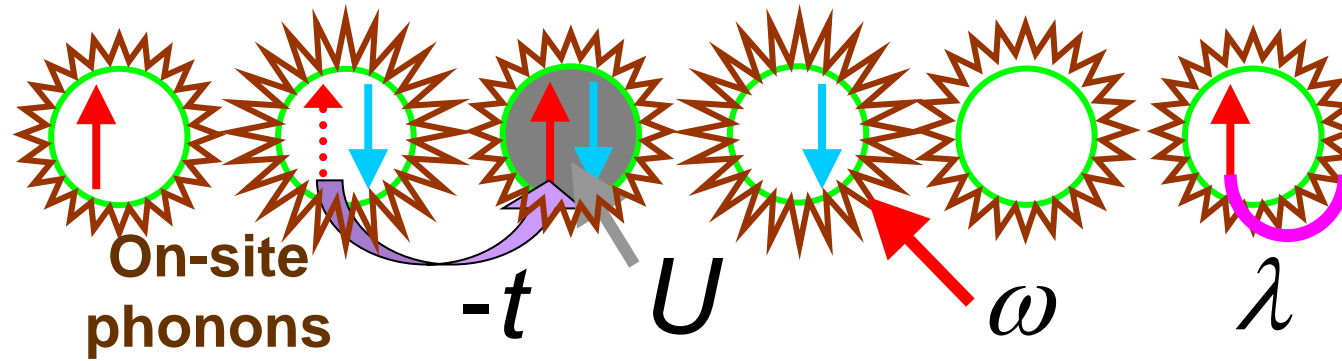


A. F. Hebard (1992)

(screened) Coulomb repulsion
 $U = 0.6 \sim 0.7 \text{ eV}$ (for t_{1u})



Hubbard-Holstein模型



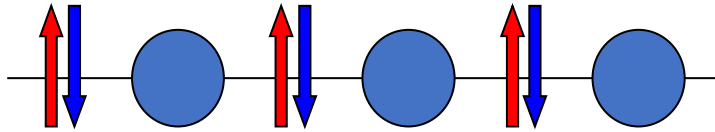
$$H = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \text{H.c.})$$

$$\begin{aligned}
 & \boxed{\text{e-e}} \quad + \quad U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \omega \sum_i b_i^\dagger b_i \\
 & + \quad \sqrt{\lambda\omega/2} \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} (b_i + b_i^\dagger) \quad \boxed{\text{e-ph}}
 \end{aligned}$$

サイトあたり1電子（ハーフフィリング） 「逆断熱近似」 $\omega \gg t$ の場合

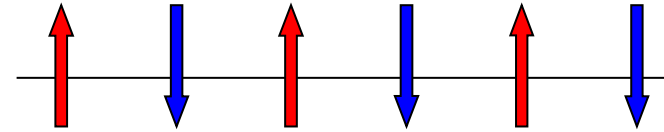
$U < \lambda$: 電子フォノン相互作用支配的

- 2個の電子が同じサイトに
入ってフォノンによる引力を
得する \rightarrow 電荷密度波



$U > \lambda$: 電子間相互作用支配的

- 電子は1つずつ、隣とスピン
を反対向きにして入る \rightarrow スピ
ン密度波

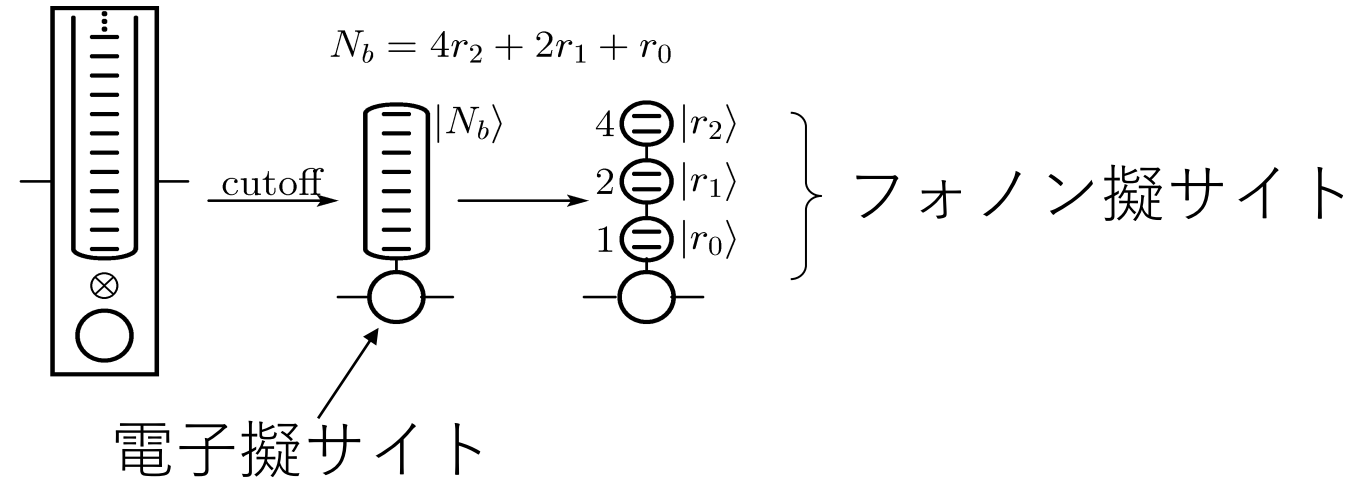


問: 中間的な領域かつ $\omega \sim t$ の場合に、超伝導が
有利になることがあるか？

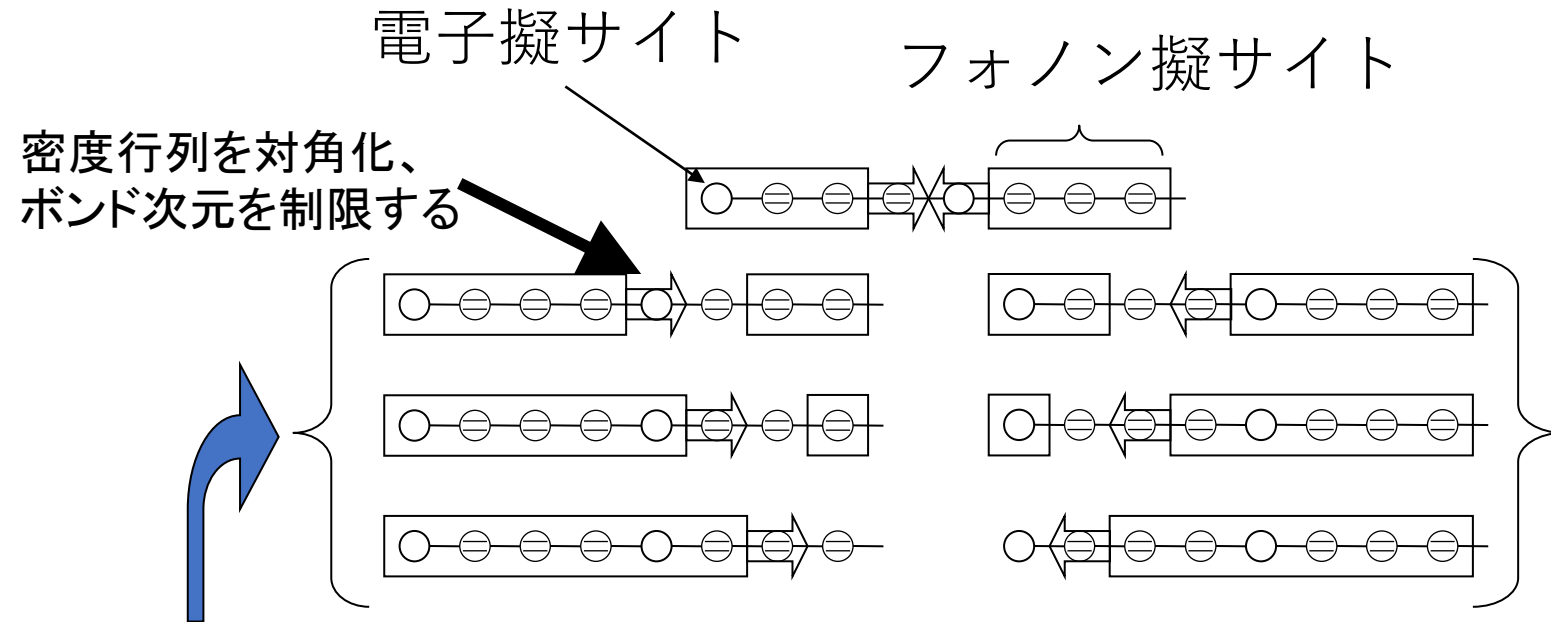
テンソルネットワークによる扱い

- DMRG (密度行列繰り込み群) 擬サイト法
 - E. Jeckelmann and S.R. White, PRB 57, 6376 (1998)

サイトあたりの自由度が大きい \rightarrow 分割する



DMRGによる電子-フォノン系の計算



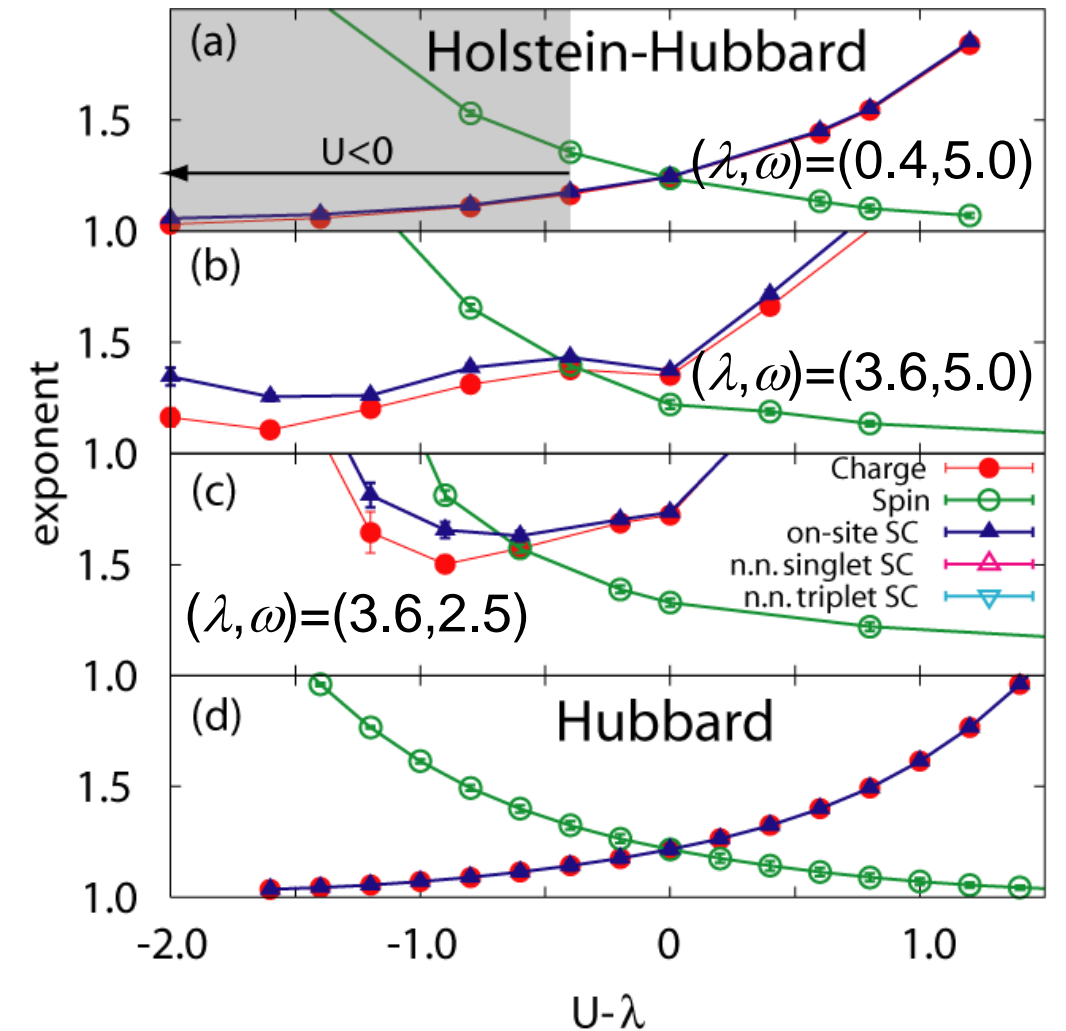
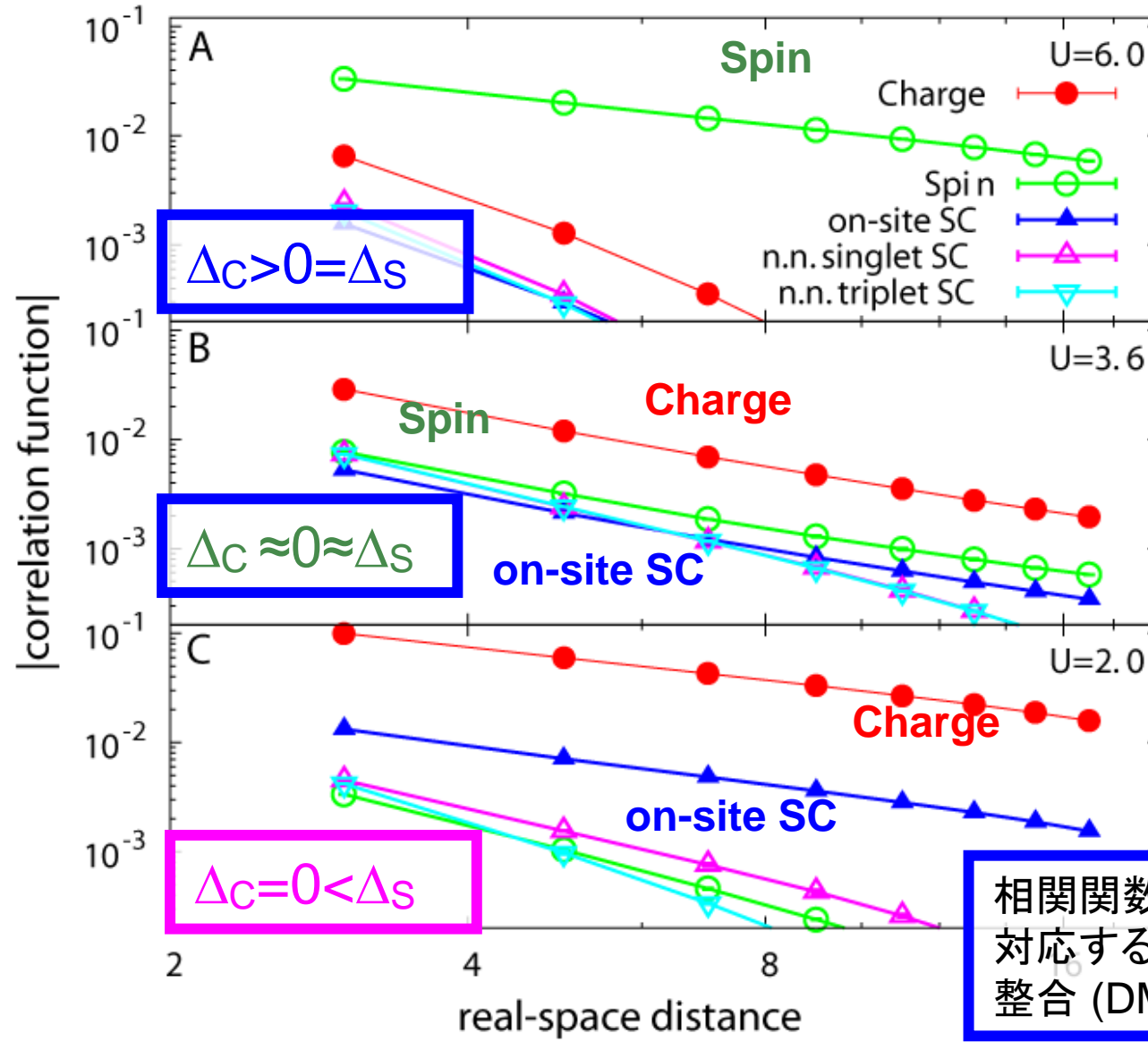
直前の状態から変換行列により
近似的な波動関数を得て、改良
[see S. R. White, PRL 77, 3633 (1996)]

MT, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 053001 (2007)

必要なサイト数に到達したら、有限系のアルゴリズムで
ボンド次元を増やしながら波動関数を改善する。

相関関数と冪

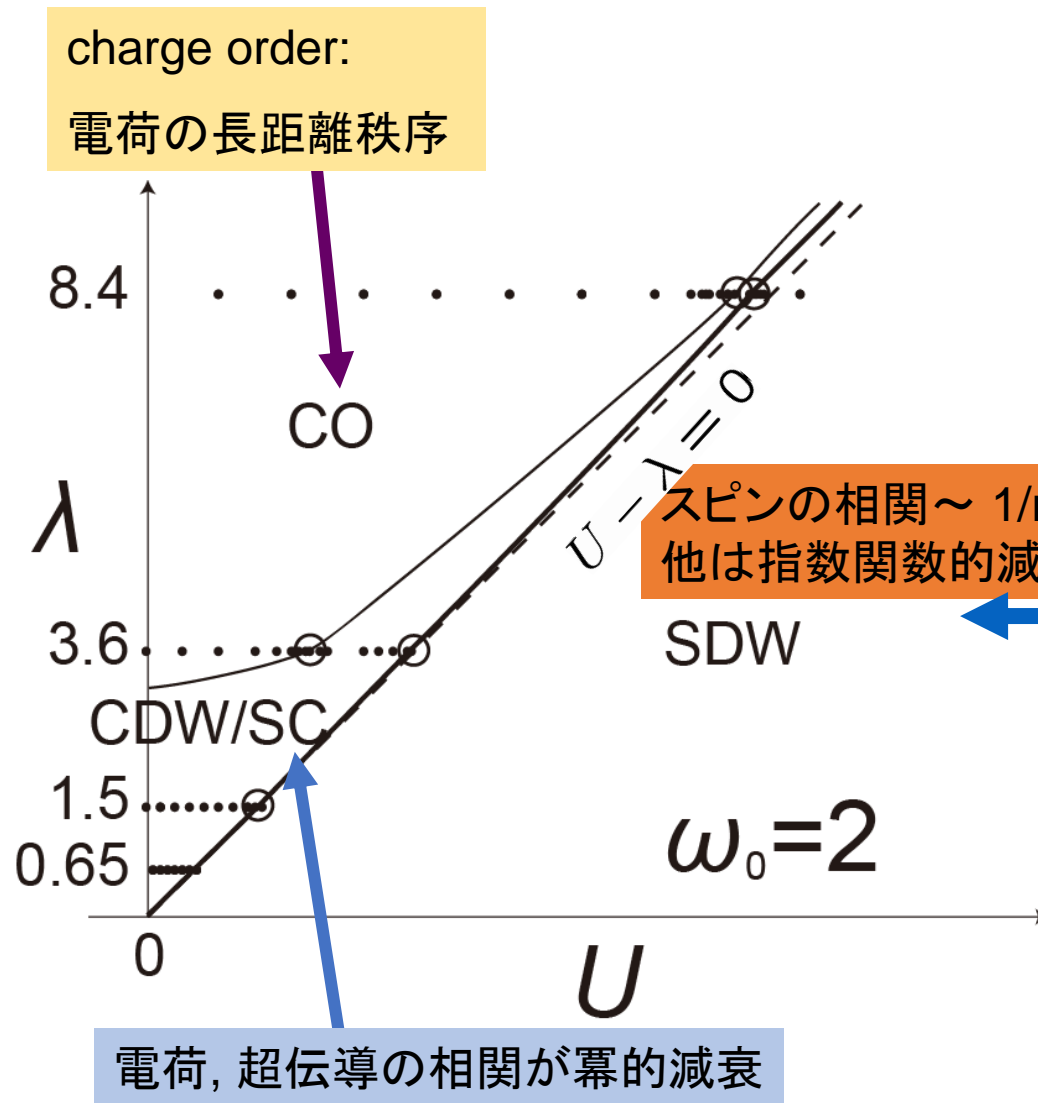
MT, Arita, and Aoki, PRL 95, 226401 (2005) $(\lambda, \omega) = (3.6, 5.0)$



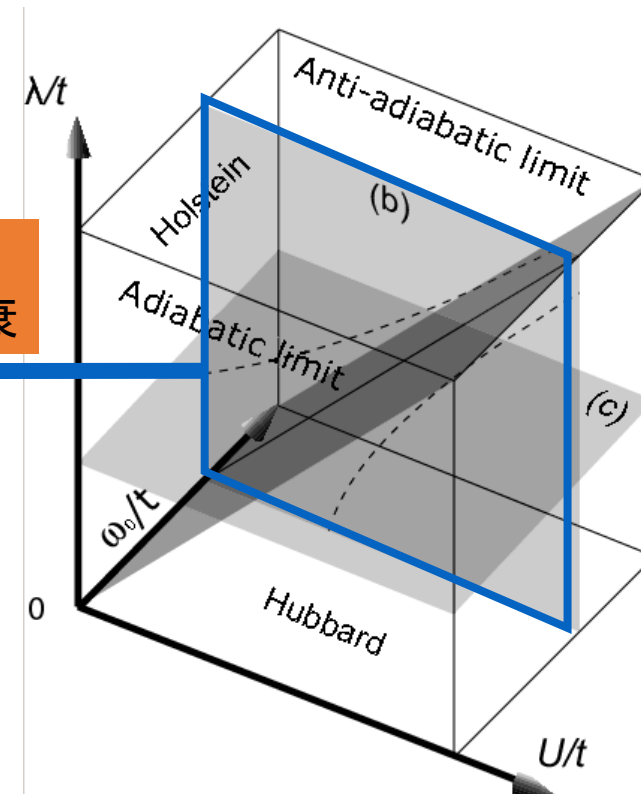
ハバード模型では
電子・ホール対称性あり

相関関数の冪的な減衰:
対応する励起ギャップ Δ_c, Δ_s が閉じるのと
整合 (DMRG, Fehske et al, PRB 2004)

相図



相関関数の減衰を比較



スピンの相関 $\sim 1/r$
他は指数関数的減衰

ボソン系を扱う動機(2) 行列模型

- ゲージ重力対応: 重力を含まない量子系から、量子重力を調べる
- **Yang-Mills型行列模型: M理論**（5つの超弦理論を統合）等の文脈で注目されてきた [Itzhaki-Maldacena-Sonnenschein 1998; Banks-Fischler-Shenker-Susskind 1997; de Wit-Hoppe-Nicolai 1988; Berenstein-Maldacena-Nastase 2002 等]
- ボソン型の例
- d 個の、トレースが0の N 次元エルミート行列 $X_1(t), \dots, X_d(t)$ を考える。
- $$S = \int dt \operatorname{Tr} \left(\frac{1}{2} \sum_I (D_t X_I)^2 - \frac{m^2}{2} \sum_I X_I^2 + \frac{g^2}{4} \sum_{I \neq J} [X_I, X_J]^2 \right),$$
- $D_t \cdot := \partial_t \cdot - i[A_t, \cdot]$, A_t はゲージ場

演算子形式

- $\hat{H} = \text{Tr} \left(\frac{1}{2} \hat{P}_I^2 + \frac{m^2}{2} \hat{X}_I^2 - \frac{g^2}{4} [\hat{X}_I, \hat{X}_J]^2 \right)$, $\hat{P}_I = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{P}_{I\alpha} \tau_{\alpha}$, $\hat{X}_I = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{X}_{I\alpha} \tau_{\alpha}$
- τ_{α} は $\text{SU}(N)$ の生成子 $\text{Tr}(\tau_{\alpha} \tau_{\beta}) = \delta_{\alpha\beta}$
- $[\hat{X}_{I\alpha}, \hat{P}_{I\beta}] = i\delta_{IJ}\delta_{\alpha\beta}$
- \hat{H} や正準交換関係は、 $\text{SU}(N)$ に属する変換で不変なゲージ一重項
 - 一重項の張るヒルベルト空間 \mathcal{H}_{inv} とする
- 一重項以外も含むヒルベルト空間 \mathcal{H}_{ext} を考えて \hat{P}_I, \hat{X}_I を定義
- \mathcal{H}_{ext} での経路積分で正しく計算できる

[e.g. M. Hanada, PRD 103, 106007 (2021);
M. Hanada, H. Shimada, and N. Wintergerst, JHEP08(2021)039]

カットオフの導入

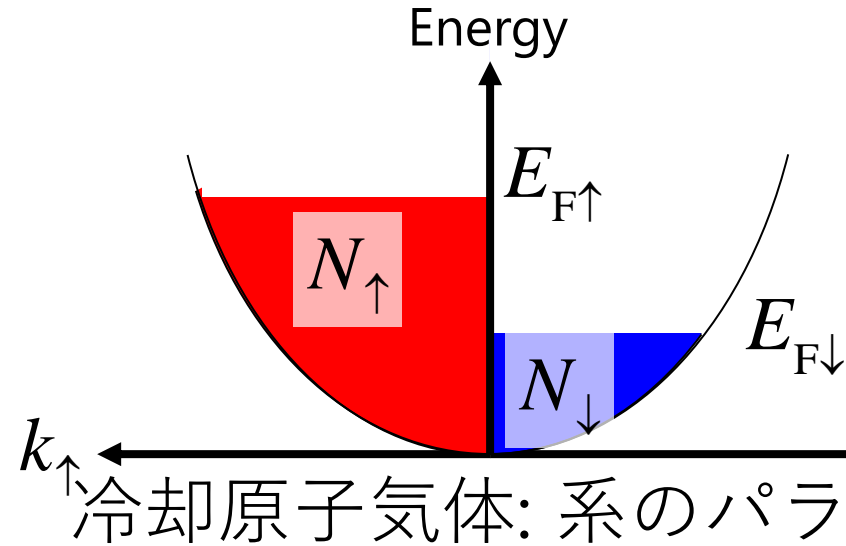
E. Rinaldi, X. Han, M. Hassan, Y. Feng, F. Nori, M. McGuigan,
and M. Hanada, PRX Quantum 3, 010324 (2022)

- $\hat{H} = \text{Tr} \left(\frac{1}{2} \hat{P}_I^2 + \frac{m^2}{2} \hat{X}_I^2 - \frac{g^2}{4} [\hat{X}_I, \hat{X}_J]^2 \right)$, $\hat{P}_I = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{P}_{I\alpha} \tau_{\alpha}$, $\hat{X}_I = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{X}_{I\alpha} \tau_{\alpha}$
- $\hat{H} = \sum_{\alpha,I} \left(\frac{1}{2} \hat{P}_{I\alpha}^2 + \frac{m^2}{2} \hat{X}_{I\alpha}^2 \right) + \frac{g^2}{4} \sum_{\gamma,I,J} \left(\sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha\beta\gamma} \hat{X}_{I\alpha} \hat{X}_{J\beta} \right)^2$ の形に書ける。
- 生成消滅演算子 $\hat{a}_{I\alpha}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m}{2}} \hat{X}_{I\alpha} - \frac{i\hat{P}_{I\alpha}}{\sqrt{2m}}$, $\hat{a}_{I\alpha} = \sqrt{\frac{m}{2}} \hat{X}_{I\alpha} + \frac{i\hat{P}_{I\alpha}}{\sqrt{2m}}$ を導入
- $\hat{H} = m \sum_{\alpha,I} \left(\hat{n}_{I\alpha} + \frac{1}{2} \right) + \frac{g^2}{16m^2} \sum_{\gamma,I,J} \left(\sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha\beta\gamma} (\hat{a}_{I\alpha} + \hat{a}_{I\alpha}^{\dagger}) (\hat{a}_{J\beta} + \hat{a}_{J\beta}^{\dagger}) \right)^2$
- ゲージ変換の生成子 $\hat{G}_{\alpha} = i \sum_{\beta,\gamma,I} f_{\alpha\beta\gamma} \hat{a}_{I\beta}^{\dagger} \hat{a}_{I\gamma}$ は \hat{H} と交換
- 各 (I, α) について $|0\rangle_{I\alpha}$ を $\hat{a}_{I\alpha}|0\rangle_{I\alpha} = 0$, $|n\rangle_{I\alpha} = \frac{(\hat{a}_{I\alpha}^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle_{I\alpha}$
- $0, \dots, \Lambda - 1 = 2^K - 1$ までの準位に制限した演算子 $\hat{a}_{I\alpha, \text{truncated}}$ を導入
- ゲージ不変ではなくなるが、 K 個の量子ビットで扱える

空間の離散化とテンソルネットワーク

2成分フェルミ気体を例として

M. Tezuka and M. Ueda,
PRL 100, 110403 (2008)

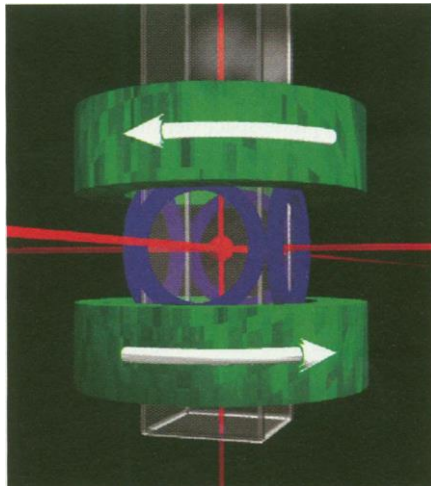


$$P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} \quad \text{imbalance parameter}$$

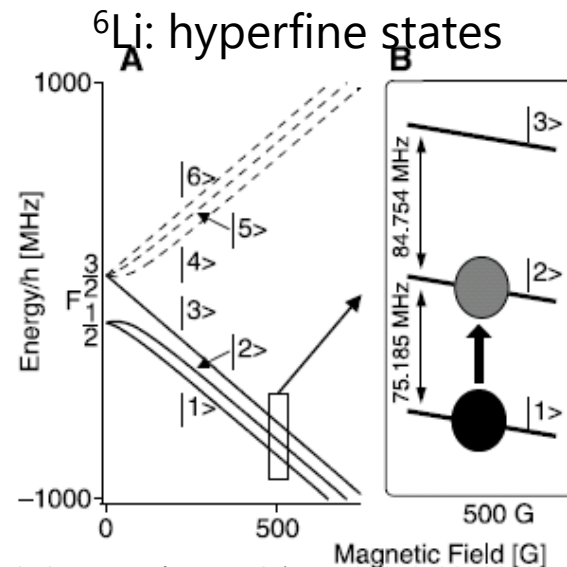
ペア凝縮 (\rightarrow 超流動)

• P の上限?

• どのようなペア?

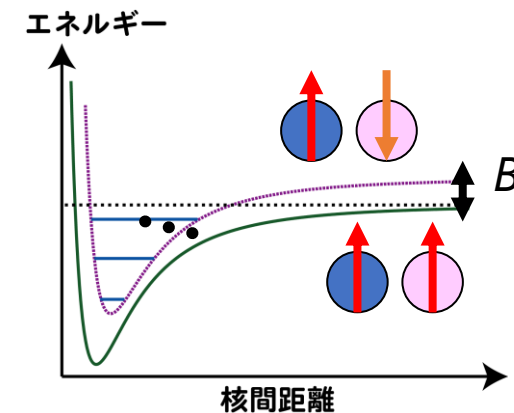


Anderson et al. (JILA), Science 269, 198 (1995)



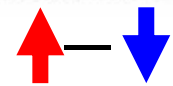
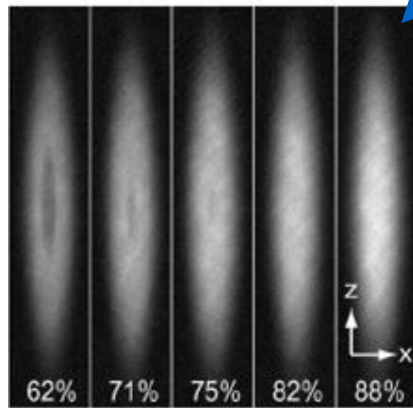
S. Gupta et al. (MIT), Science 300, 1723 (2003)

Feshbach 共鳴 \rightarrow 相互作用可変



実験

• MIT



超流動: $P < 0.75$

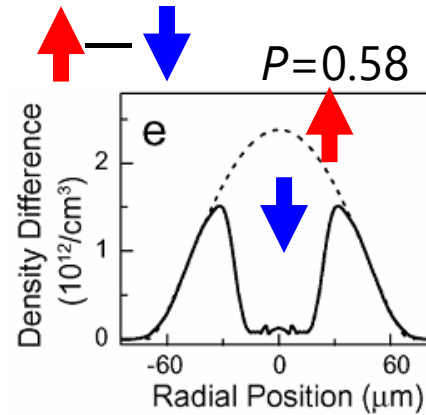
局所密度近似と整合

→ 均一系の相図

quantized vortices also observed

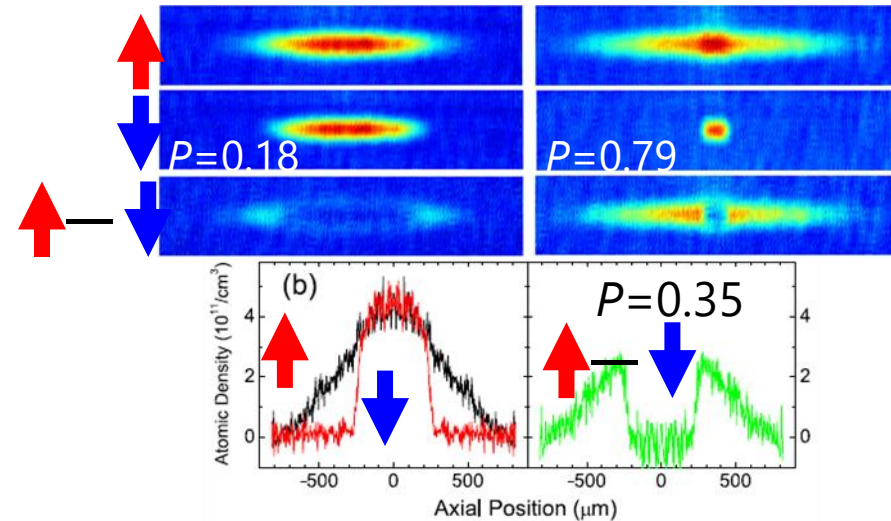
Zwierlein et al., Science 311, 492 (2006)
 Schunck et al., Science 316, 867 (2007)
 Shin et al., Nature 451, 689 (2008) and refs

アスペクト比 ~ 5
 $N \sim 10^7$ 原子



• Rice Univ.

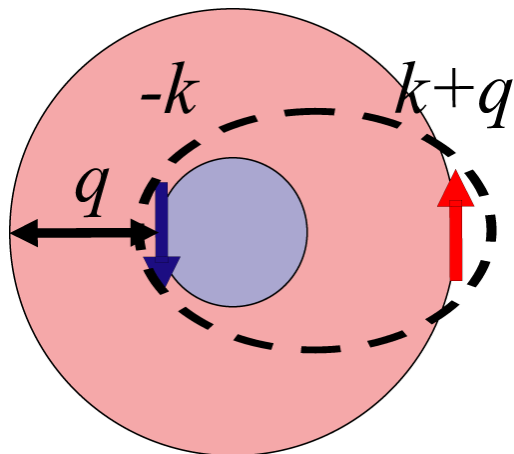
アスペクト比 $\sim 30, 3$
 $N \sim 10^5$



$P \sim 0.99$ でも凝縮体、密度差一定部分
 局所密度近似からのずれ → 表面張力

Partridge et al., Science 311, 503 (2006);
 PRL 97, 190407 (2006)
 Li et al., Nucl. Phys. A 790, 88c (2007)

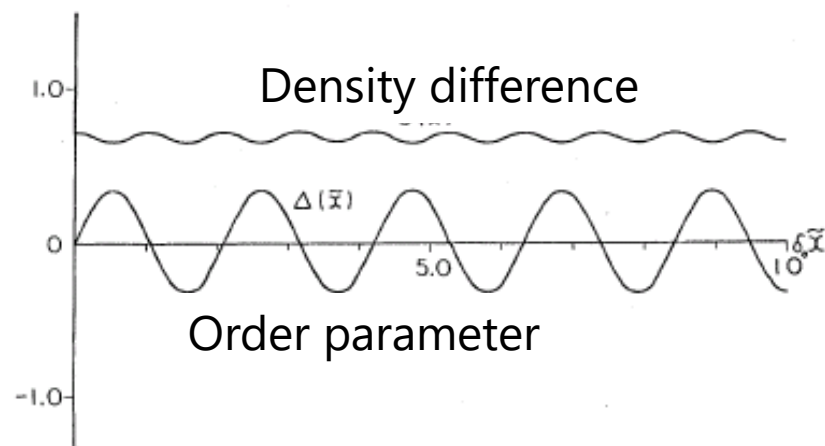
運動量をもったペア: FF, LO 状態



Fulde and Ferrell : $\Delta \sim \exp(iqx)$

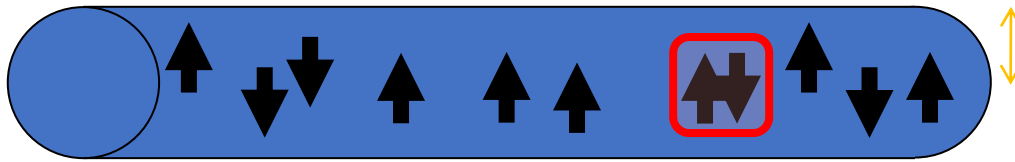
Larkin and Ovchinnikov : $\Delta \sim \cos(qx)$

- LO: 密度差は波数 $2q$ で振動



Machida and Nakanishi, PRB 30, 122 (1984)

1次元的トラップ



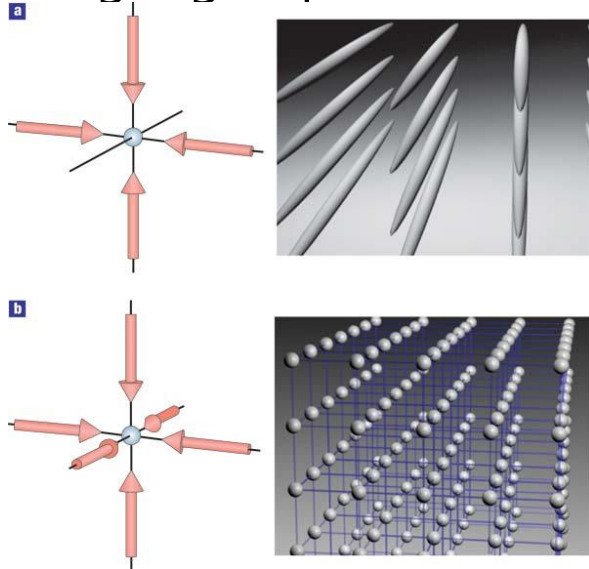
s-wave scatt. length ($\propto g^{-1}$)

$$a_{1D} = -\frac{a_{\perp}^2}{2a} \left(1 - C \frac{a}{a_{\perp}} \right)$$

Olshanii, PRL 1998

運動エネルギー ≪ 半径方向の準位間隔

2D 光格子 → 1D トラップの配列
(Esslinger group, ETH Zürich)



軸方向の弱い閉じ込め → 有限の長さ

Moritz *et al.*, PRL 94, 210401 (2005)

^{40}K , $a_{\perp} = 86\text{nm}$, $\omega_z = 2\pi \times 256\text{Hz} \sim \omega_{\perp}/270$

1.5×10^5 atoms in 70×70 tubes

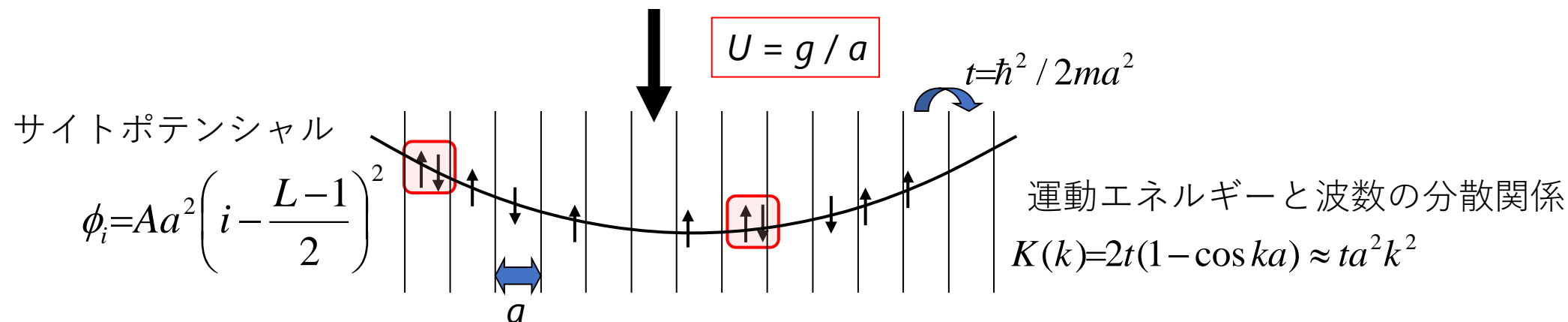
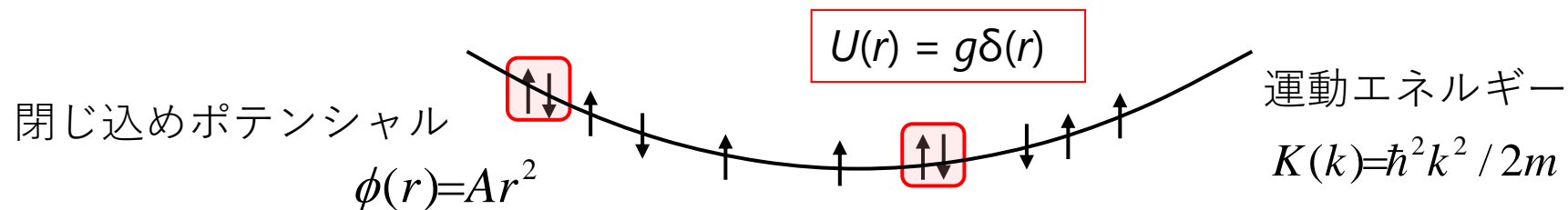
ペア凝縮

- P の上限?
- どのようなペア?

→ DMRG analysis

I. Bloch, Nature Phys. (2005)

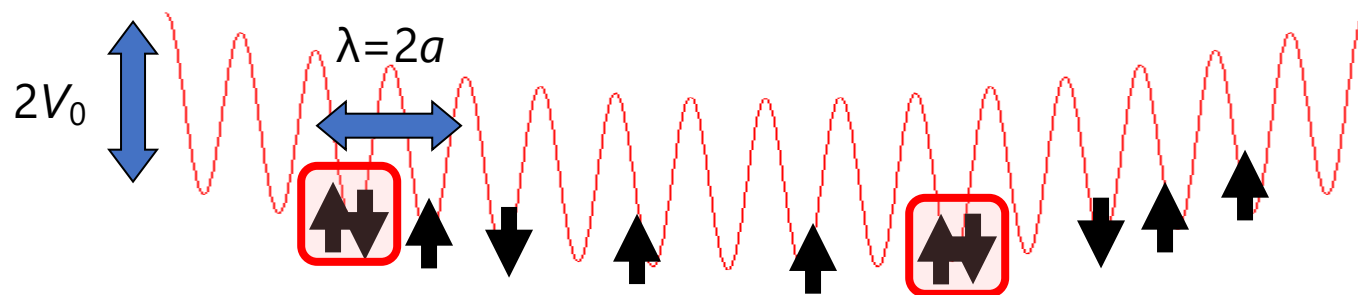
空間の離散化



L -site ハバード模型

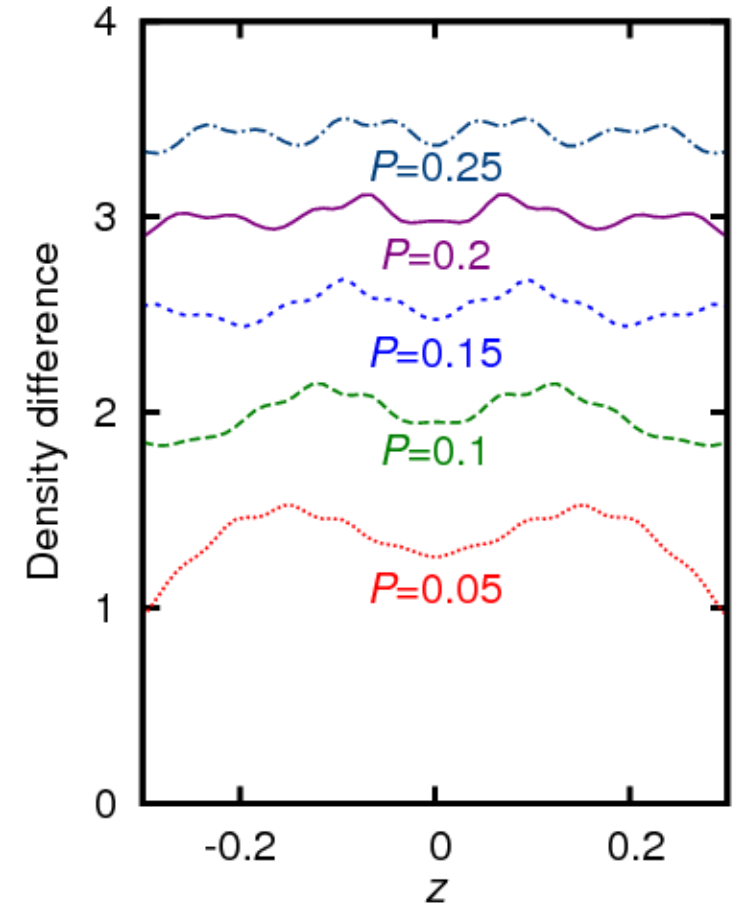
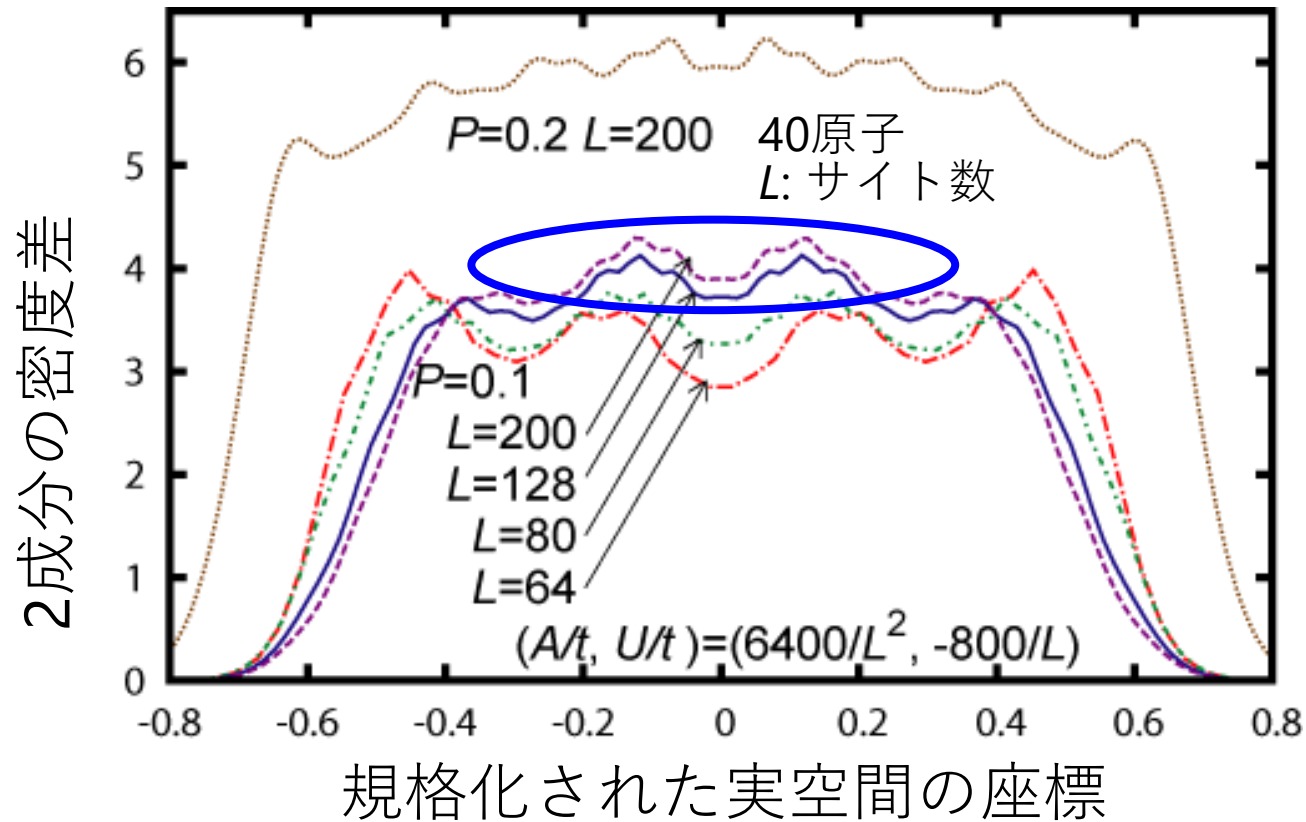
$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma=\uparrow, \downarrow} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i,\sigma} \phi_i \hat{n}_{i\sigma}$$

cf. 光格子系



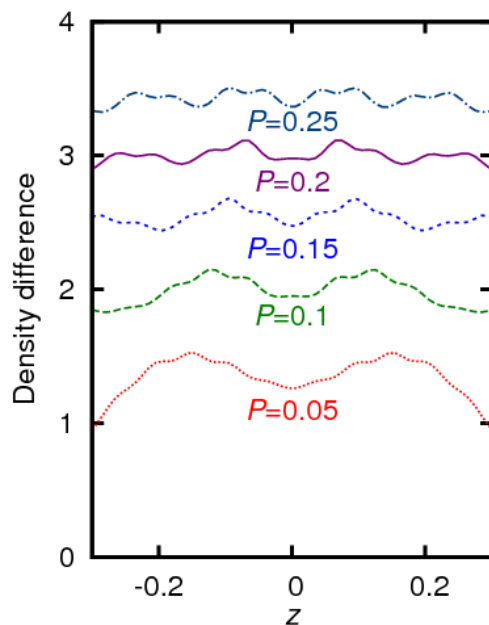
連続系の、格子系を利用した計算

格子間隔が小さい極限 = 連続系



密度分布: 導入した格子と非整合な振動

密度差の振動の波数と、フェルミ波数の差の比例関係 → LO 状態!

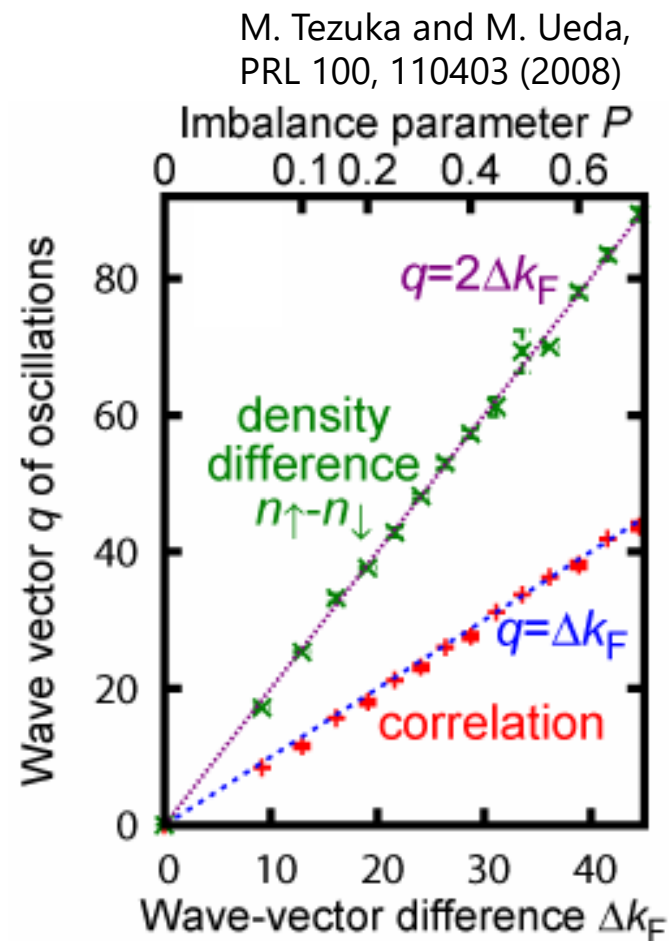
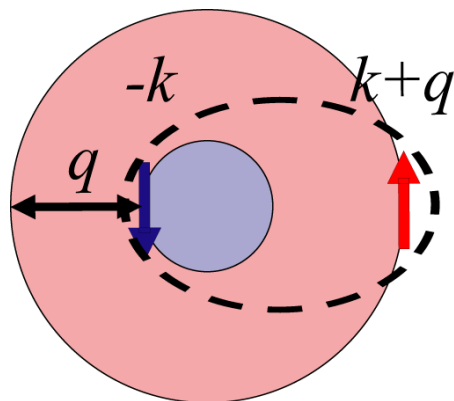


密度差:
定数項 + 振動部分

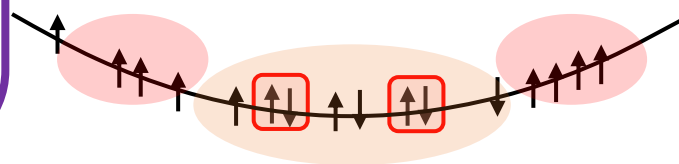
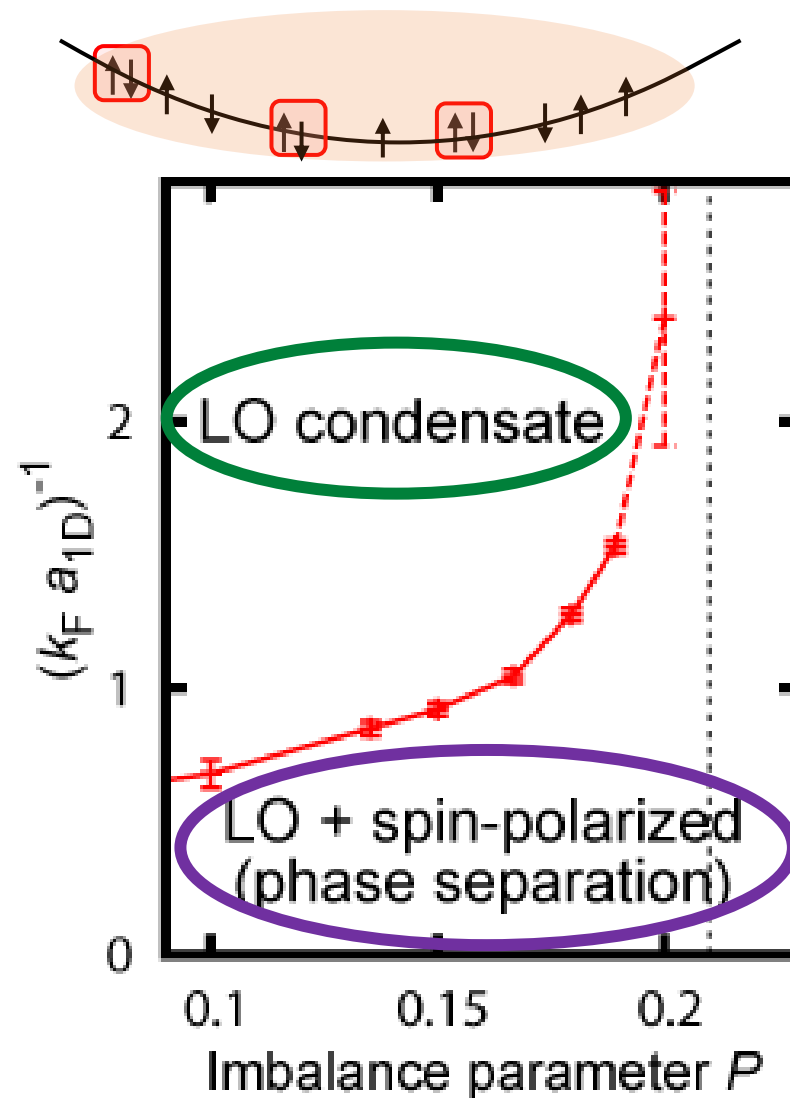
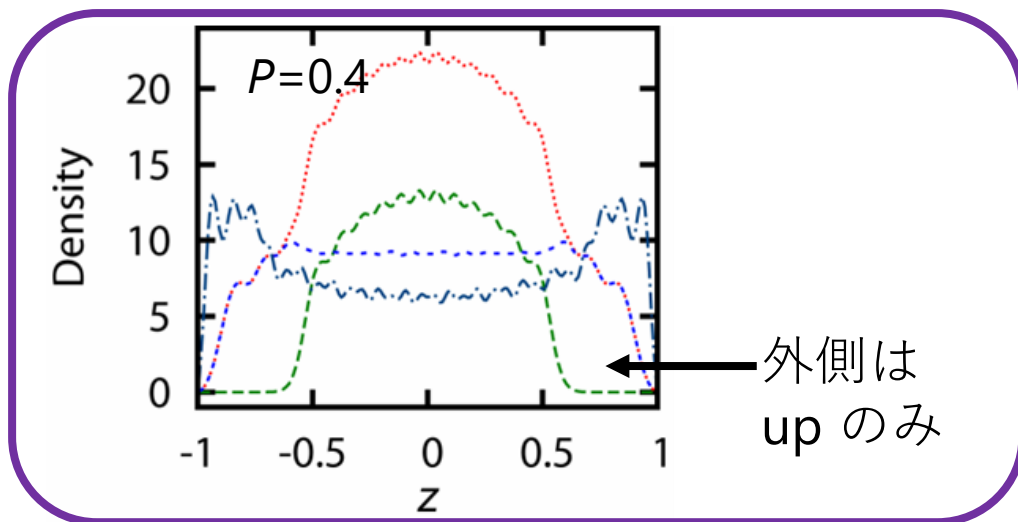
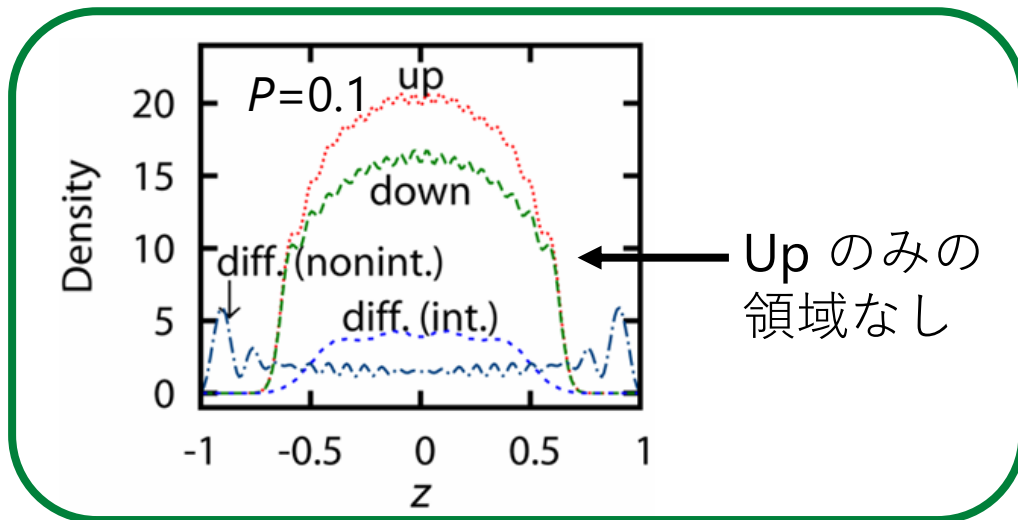
→ Δk_F

ペア相関関数: 周期的な符号変化

→ Consistent with
LO pairing state!



相図



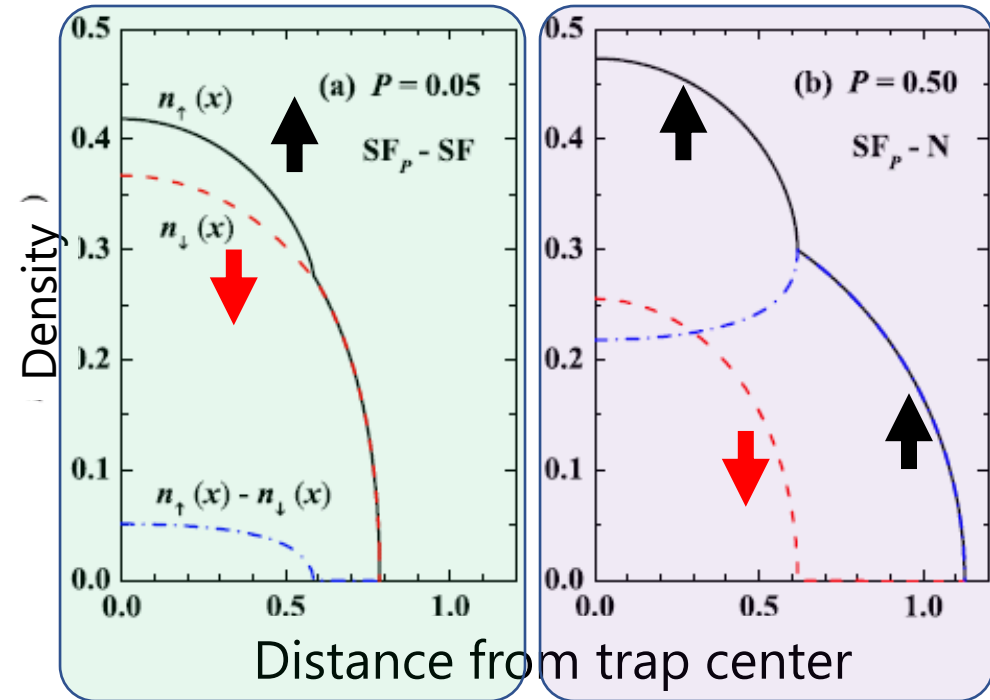
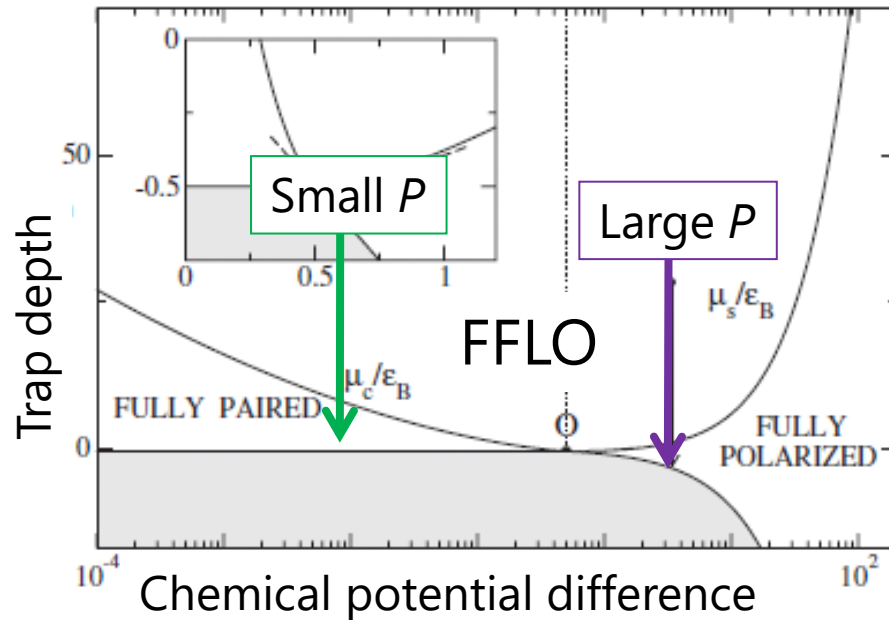
1D: LDA (局所密度近似)

閉じ込めのない系の厳密解を貼り合わせる

(Yang's generalised Bethe ansatz → Gaudin's integral equation)

Orso, PRL 98, 070402 (2007)

Hu, Liu and Drummond, PRL 98, 070403 (2007)



→ 我々のDMRGの結果と整合

DMRG, MC and DFT results for 1D Hubbard model with imbalance and trap:

Feiguin and Heidrich-Meisner, PRB 76, 220508(R) (2007);

Xianlong et al., PRA 77, 033604(2008); Machida et al., PRA 77, 053614 (2008) and refs

1次元調和振動子の量子力学の復習

離散化：有限自由度での取り扱い

ボソン系の離散化の影響評価

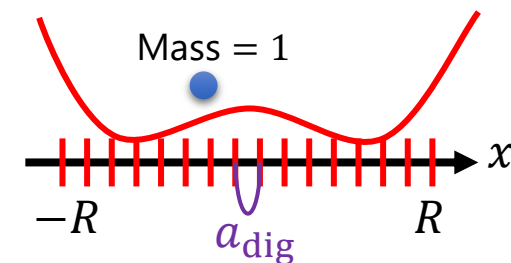
- ここでは、場の値の離散化の効果を主に扱う
 - 最大値, 最小値は充分大きくとる
- 同じ方法で、カットオフの大きさの効果も評価可能
- 例1. 1個の非調和振動子
- 例2. 2次元正方格子上の自由スカラー場

例1: 1個の非調和振動子 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x)$

- 配位: 1個の整数 $n \in \{0, 1, \dots, \Lambda - 1\}$ を各虚時間ステップで考える

$$j \in \{1, 2, \dots, K\}$$

$$x(n) = -R + na_{\text{dig}}, a_{\text{dig}} \equiv \frac{2R}{\Lambda - 1}$$



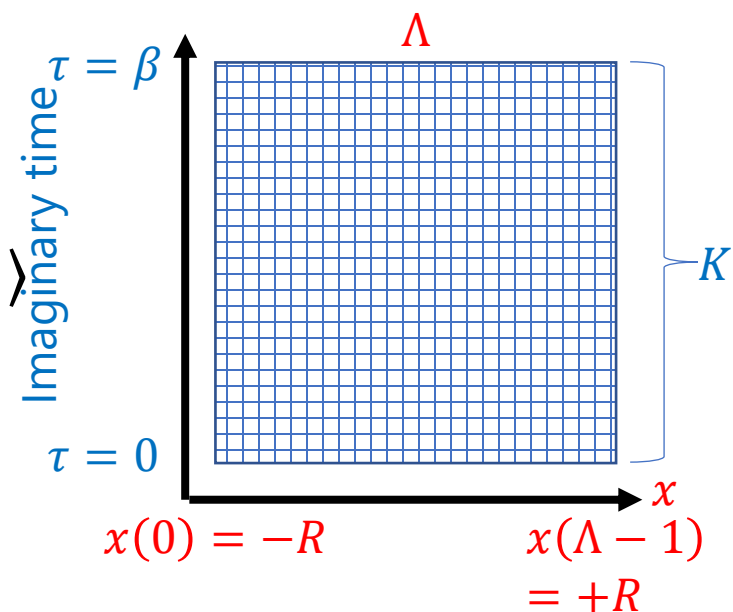
- 分配関数 逆温度 $\beta = K\Delta$

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}$$

$$\simeq \sum_{n^{(1)}, \dots, n^{(K)}} \langle n^{(1)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(2)} \rangle \langle n^{(2)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(3)} \rangle \dots \langle n^{(K)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(1)} \rangle$$

- 運動エネルギー項の近似

$$\hat{p}^2 = (-i\nabla)^2 = \frac{1}{a_{\text{dig}}^2} \{2|n\rangle\langle n| - (|n+1\rangle\langle n| + \text{c.c.})\}$$



$\hbar = 1$ in this talk

例1: 1個の非調和振動子 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x)$

- 逆温度 $\beta = \Delta \times K$ での分配関数

$$x(n) = -R + na_{\text{dig}}, \\ n \in \{0, 1, \dots, \Lambda - 1\}$$

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \simeq \sum_{n^{(1)}, \dots, n^{(K)}} \langle n^{(1)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(2)} \rangle \langle n^{(2)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(3)} \rangle \dots \langle n^{(K)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(1)} \rangle$$

- $\langle n^{(j)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(j+1)} \rangle \simeq \left\langle n^{(j)} \left| \exp \left(-\Delta \frac{\hat{p}^2}{2} \right) \right| n^{(j+1)} \right\rangle \exp \left(-\Delta V \left(x(n^{(j+1)}) \right) \right)$ if Δ is sufficiently small.

$$\left\langle n^{(j)} \left| \exp \left(-\Delta \frac{\hat{p}^2}{2} \right) \right| n^{(j+1)} \right\rangle \simeq \left\{ \left(1 - \frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \right) \delta_{n^{(j)}, n^{(j+1)}} + \frac{\Delta}{2a_{\text{dig}}^2} (\delta_{\vec{n}^{(j)}, \vec{n}^{(j+1)}+1} + \delta_{\vec{n}^{(j)}, \vec{n}^{(j+1)}-1}) \right\}$$

は $1 - \frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} > 0$ のとき $n^{(j)}, n^{(j+1)}$ によらず非負。

- 符号問題なしのモンテカルロ計算が可能。

Markov Chain Monte Carlo: update algorithm (1)

- 当初の配位: すべての $n^{(j)} = \frac{\Lambda}{2}, j = 1, 2, \dots, K (= \frac{\beta}{\Delta})$

1サイトごとの (local) 更新

- 提案: $n^{(j)}$ のうち1つを ± 1 ずらす (確率 $\frac{1}{2}$)

- 下記を満たさない場合却下:

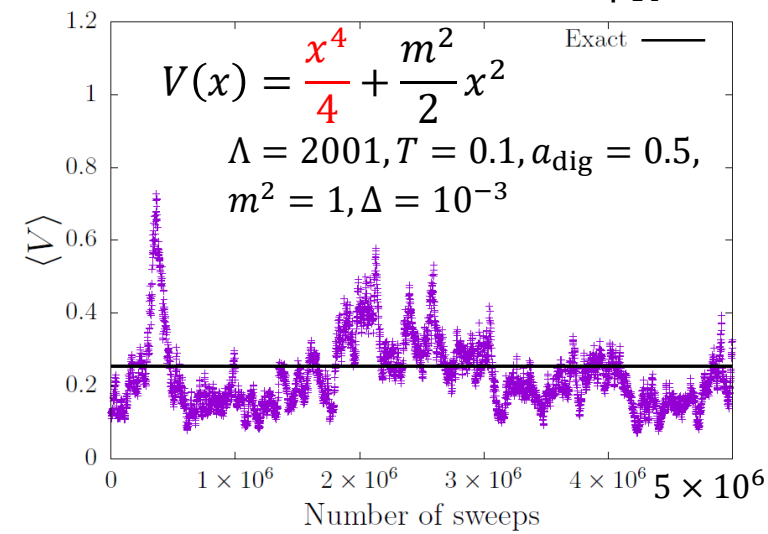
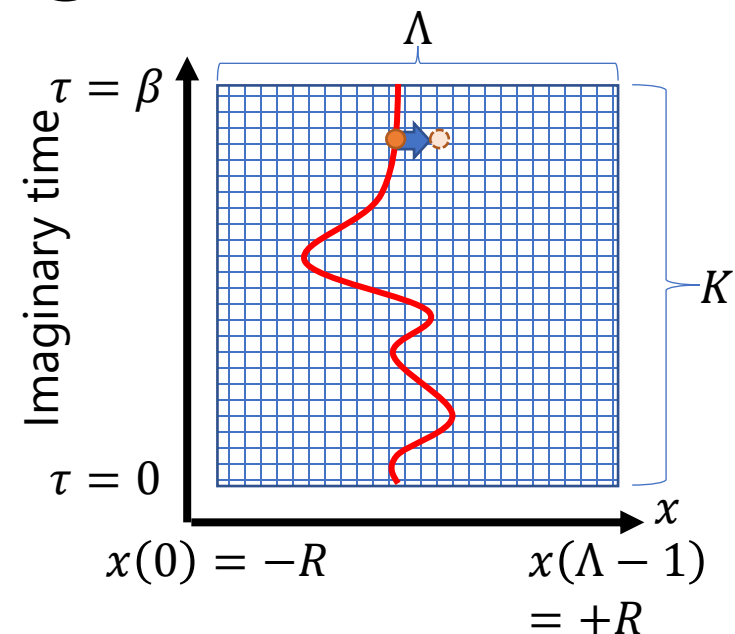
- $0 \leq n' \leq \Lambda - 1$

- $|n' - n^{(j+1)}| = 0 \text{ or } 1, |n' - n^{(j-1)}| = 0 \text{ or } 1$

- Metropolis テスト : 採択確率 $\min(1, e^{-\delta S})$

- δS は作用 S の増分 ($Z = e^{-S}$)

➤ 非効率 (ほとんど変化しない)



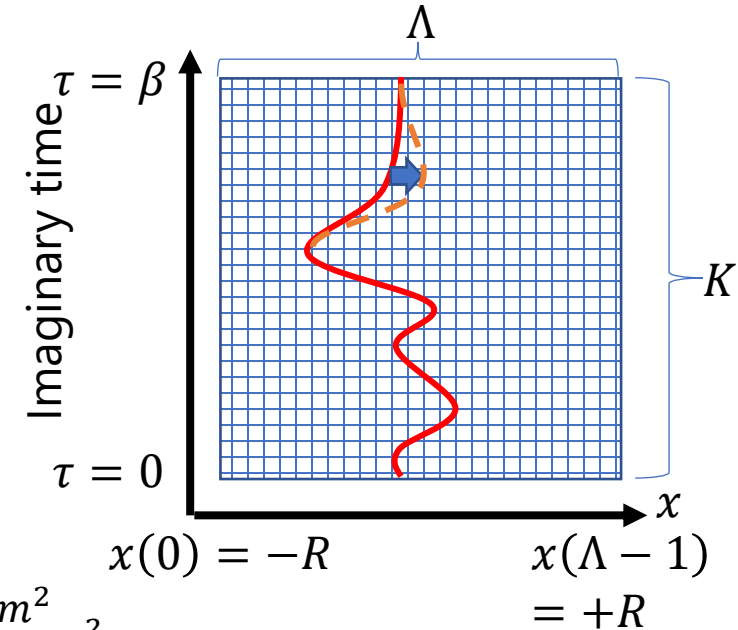
Markov Chain Monte Carlo: update algorithm (2)

- 当初の配位: すべての $n^{(j)} = \frac{\Lambda}{2}, j = 1, 2, \dots, K (= \frac{\beta}{\Delta})$

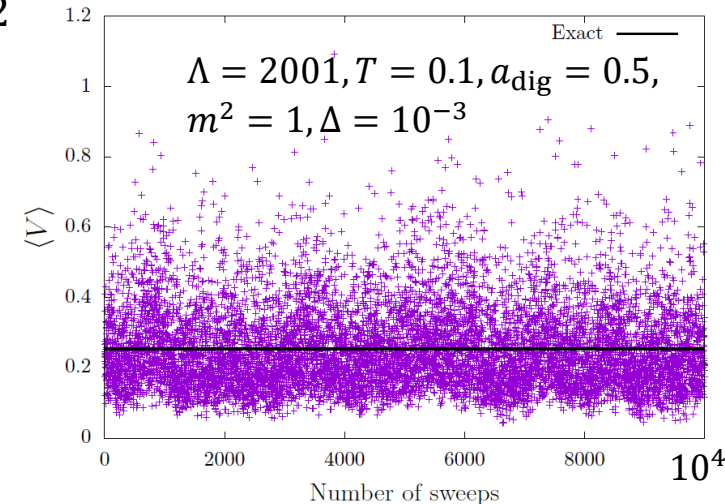
クラスタ (ブロック) 更新

- Random block size $1 \leq B \leq B_{\max} = \frac{K}{2}$
- Proposal: shift $n^{(j)}, n^{(j+1)}, \dots, n^{(j+B)}$ by ± 1
 - automatically rejected unless:
 - $0 \leq n'^{(j)}, \dots, n'^{(j+B)} \leq \Lambda - 1$
 - $|n'^{(j+B)} - n^{(j+B+1)}| = 0 \text{ or } 1, |n'^{(j)} - n^{(j-1)}| = 0 \text{ or } 1$
- Metropolis test: accept with prob. $\min(1, e^{-\delta S})$
 - δS is the increment of the action

➤ Efficient update with shorter autocorrelation length



$$V(x) = \frac{x^4}{4} + \frac{m^2}{2}x^2$$



例1: 1個の 非調和 振動子 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x)$

- $V(x) = \frac{x^4}{4} + \frac{m^2}{2}x^2$, dependence on a_{dig} and m^2

- $\langle V \rangle_{T=0.1}$: Results for 10^4 sweeps

- cutoff: $R = 1000a_{\text{dig}}$, $\Lambda = 2R + 1 = 2001$

$$\frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \ll 1$$

a_{dig}	$m^2 = 1.0$, MC	$m^2 = 1.0$, Exact	$m^2 = -1.0$, MC	$m^2 = -1.0$, Exact
0.3	0.2626(26)	0.2618	-0.06326(68)	-0.06354
0.5	0.2533(53)	0.2539	-0.0664(27)	-0.06633
0.7	0.2482(70)	0.2414	-0.0717(18)	-0.07024

- At each a_{dig} , Monte Carlo (MC) results ($\Delta = 10^{-3}$) converge to exact diagonalization (Exact) values

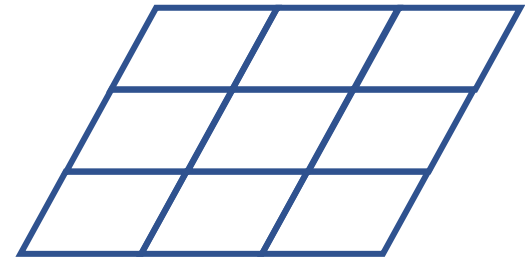
⇔ Exact diagonalization is not possible for much larger systems

➤ MCMC can still be used without sign problem!

例2: 2次元自由スカラー場

- 正方 d 次元格子, $N_{\text{bos}} = L^d$ 個のボソン

$$\hat{H}_{\text{lat}} = \sum_{\vec{n}} \left(\frac{1}{2} \hat{\pi}_{\vec{n}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d (\hat{\phi}_{\vec{n}+\hat{\mu}} - \hat{\phi}_{\vec{n}})^2 \right) + V(\vec{\phi})$$



- N_{bos} 個の整数 $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_{N_{\text{bos}}})$, $\phi_i(n_i) = -R + n_i a_{\text{dig}}$
- $Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \simeq \sum_{\vec{n}^{(1)}, \dots, \vec{n}^{(K)}} \langle \vec{n}^{(1)} | e^{-\Delta \hat{H}} | \vec{n}^{(2)} \rangle \langle \vec{n}^{(2)} | e^{-\Delta \hat{H}} | \vec{n}^{(3)} \rangle \dots \langle \vec{n}^{(K)} | e^{-\Delta \hat{H}} | \vec{n}^{(1)} \rangle$
- $\langle \vec{n}^{(j)} | e^{-\Delta \hat{H}} | \vec{n}^{(j+1)} \rangle \simeq \left\langle \vec{n}^{(j)} \left| \exp \left(-\Delta \sum_i \frac{\hat{\pi}_i^2}{2} \right) \right| \vec{n}^{(j+1)} \right\rangle \exp \left(-\Delta V(\vec{n}^{(j+1)}) \right)$
 - $\vec{n}^{(j)}, \vec{n}^{(j+1)}$ が何でも、 $1 - \frac{N_{\text{bos}} \Delta}{a_{\text{dig}}^2} > 0$ であれば非負.
- 符号問題のないMCMCが可能。

厳密な2点相関

2D (4×4 周期境界条件), 自由なスカラー場

$$V(\vec{\phi}) = \frac{m_{\text{lat}}^2}{2} \sum_{\vec{n}} \hat{\phi}_{\vec{n}}^2, m_{\text{lat}} = m a_{\text{lat}}, m^2 = 1, N_{\text{bos}} = 4^2 = 16$$

$$\hat{H}_{\text{lat}} = \sum_{\vec{n}} \left(\frac{1}{2} \hat{\pi}_{\vec{n}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{d=2} (\hat{\phi}_{\vec{n}+\hat{\mu}} - \hat{\phi}_{\vec{n}})^2 + \frac{m_{\text{lat}}^2}{2} \hat{\phi}_{\vec{n}}^2 \right) = \sum_{\vec{q}} \left(\frac{1}{2} \hat{\pi}_{\vec{q}} \hat{\pi}_{-\vec{q}} + \frac{\omega_{\text{lat},\vec{q}}^2}{2} \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \right)$$

with $\omega_{\text{lat},\vec{q}}^2 = m_{\text{lat}}^2 + 4 \sum_{\mu=1}^d \sin^2 \left(\frac{q_{\mu}}{2} \right)$.

$\Delta \rightarrow 0, R \rightarrow \infty, a_{\text{dig}} \rightarrow 0$ で期待される値

$$T \rightarrow 0: \text{零点振動} \quad \left\langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \right\rangle = \frac{1}{2\omega_{\text{lat},\vec{q}}}$$

$$\text{有限の } T = \frac{1}{\beta}: \left\langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \right\rangle = \frac{1}{2\omega_{\text{lat},\vec{q}} \tanh \frac{\beta \omega_{\text{lat},\vec{q}}}{2}}$$

我々の計算: $\Lambda = 2001 < 2^{11}, \beta = 1$, 最大のクラスタサイズ $B = K/2$

(a_{dig}, Δ) は $\frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \leq 0.01 \left(\frac{N_{\text{bos}} \Delta}{a_{\text{dig}}^2} \leq 0.16 \right)$ となるように選択した。

例2: 2次元自由スカラー場

$$V(\vec{\phi}) = \frac{m_{\text{lat}}^2}{2} \sum_{\vec{n}} \hat{\phi}_{\vec{n}}^2, m_{\text{lat}} = m a_{\text{lat}}, m^2 = 1, N_{\text{bos}} = 4^2 = 16$$

$\Delta \rightarrow 0, R \rightarrow \infty, a_{\text{dig}} \rightarrow 0$ で期待される値

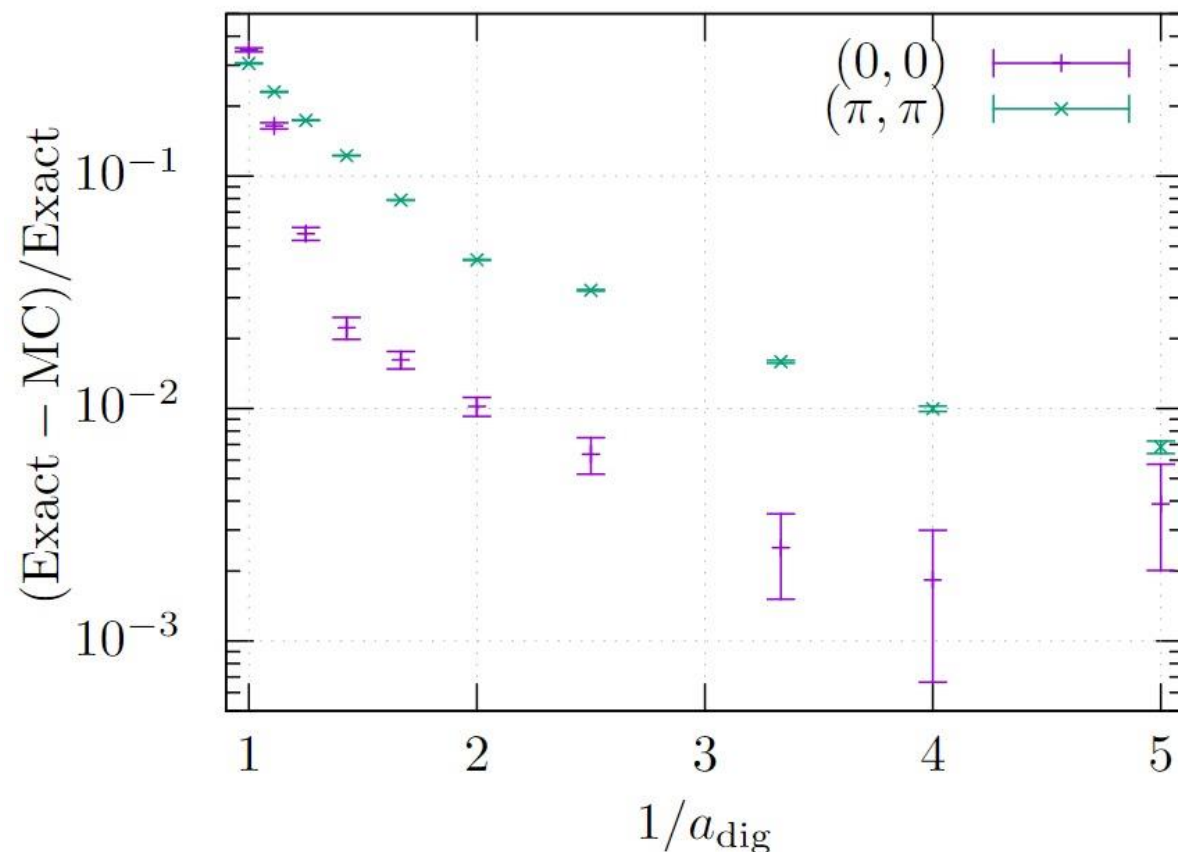
$$\text{有限の } T: \langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \rangle = \frac{1}{2\omega_{\text{lat},\vec{q}} \tanh \frac{\beta\omega_{\text{lat},\vec{q}}}{2}}$$

シミュレーション結果

a_{dig}	Δ	$K = \beta/\Delta$	$\vec{q} = (0, 0)$	$\vec{q} = (\pi, \pi)$
0.20	0.0008	1250	1.0778(20)	0.18288(8)
0.25	0.00125	800	1.0800(13)	0.18230(5)
0.30	0.0015	667	1.0793(11)	0.18120(4)
0.40	0.002	500	1.0751(12)	0.17819(4)
0.50	0.002	500	1.0709(10)	0.17611(3)
0.60	0.005	200	1.0645(15)	0.16961(4)
0.70	0.005	200	1.0579(26)	0.16156(6)
0.80	0.005	200	1.0208(39)	0.15214(10)
0.90	0.005	200	0.9039(55)	0.14167(17)
1.00	0.005	200	0.7038(70)	0.12792(25)

我々の計算: $\Lambda = 2001, \beta = 1$,
最大のクラスタサイズ $B = K/2$

(a_{dig}, Δ) は $\frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \leq 0.01$ となるよう選択



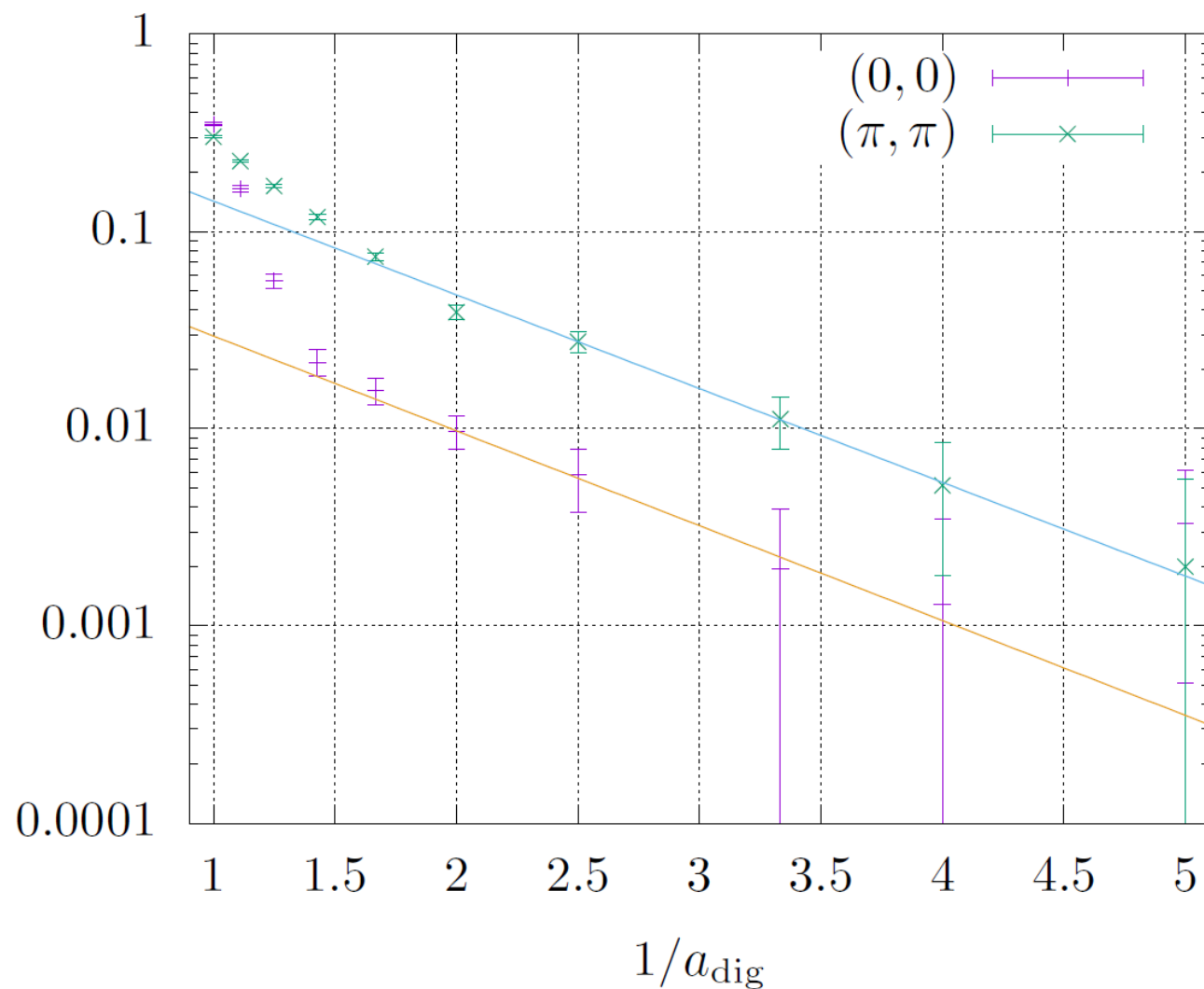
厳密な値を知らない場合？

$$\langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \rangle = A e^{-\frac{B}{a_{\text{dig}}}} + C$$

として、 A, B, C に関してfit

\vec{q}	(0,0)	(π, π)
厳密値	1.0819	0.1841
Fit 結果	1.0814(10)	0.18324(10)

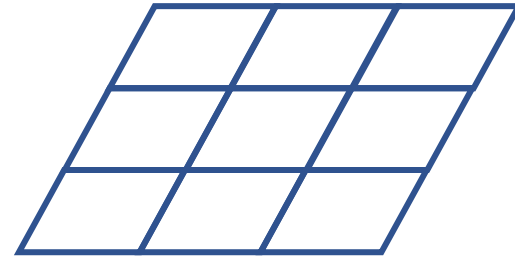
(Fit - MC)/Fit



例2: 2次元自由スカラー一場

2D, **free** scalar field theory (periodic boundary condition)

$$\hat{H}_{\text{lat}} = \sum_{\vec{n}} \left(\frac{1}{2} \hat{\pi}_{\vec{n}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d (\hat{\phi}_{\vec{n}+\hat{\mu}} - \hat{\phi}_{\vec{n}})^2 \right) + V(\vec{\phi}), V(\vec{\phi}) = \frac{m_{\text{lat}}^2}{2} \sum_{\vec{n}} \hat{\phi}_{\vec{n}}^2, m_{\text{lat}} = m a_{\text{lat}}$$



Similar MCMC simulation is possible!

Negative sign does not occur if $\frac{N_{\text{bos}} \Delta}{a_{\text{dig}}^2} < 1$

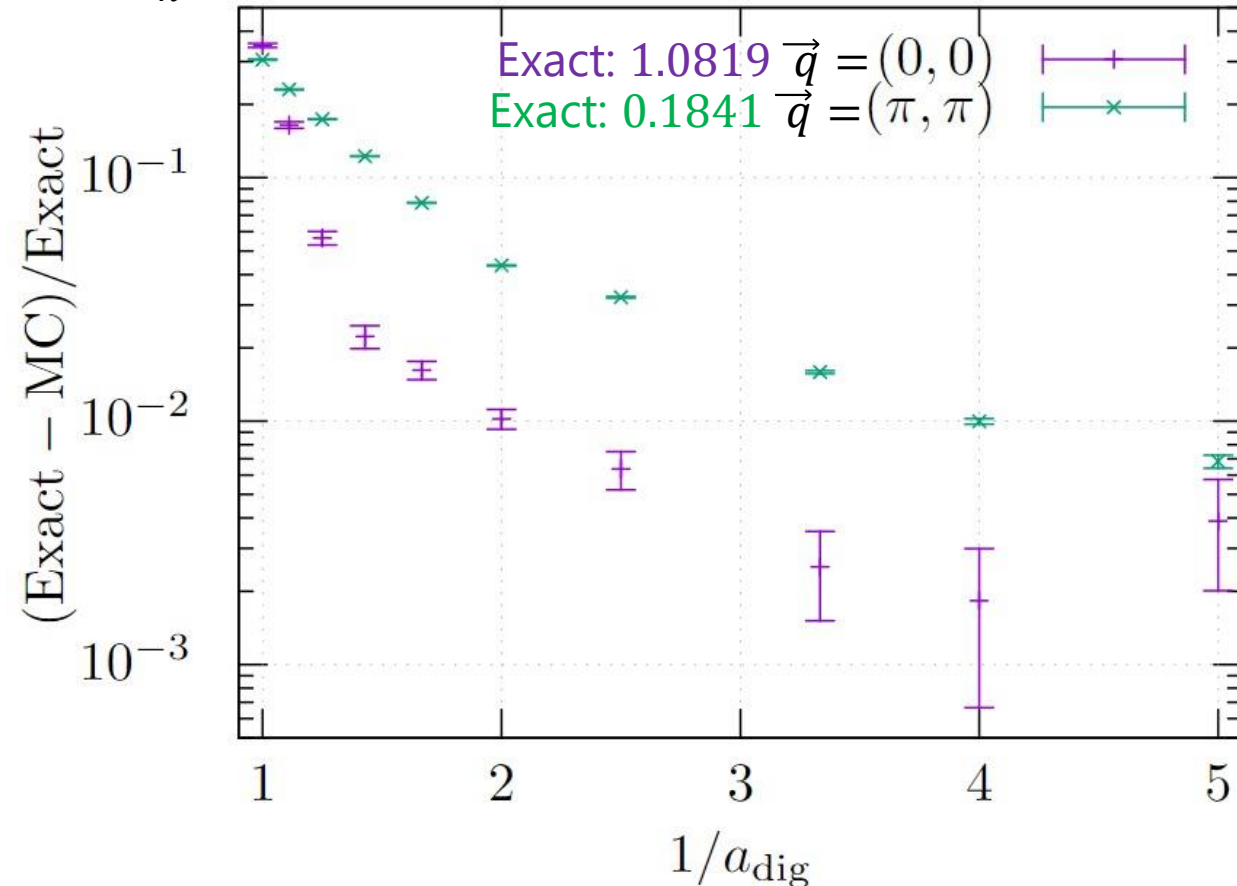
Our simulation: $\Lambda = 2001, \beta = 1, m^2 = 1,$
 $N_{\text{bos}} = 4^2 = 16$

Choose $(a_{\text{dig}}, \Delta = \beta/K)$ so that $\frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \leq 0.01$

maximum cluster size $B = K/2$

Exact values for $\Delta \rightarrow 0, R \rightarrow \infty, a_{\text{dig}} \rightarrow 0$

$$\text{Finite } T = \frac{1}{\beta} \langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \rangle = \frac{1}{2\omega_{\text{lat},\vec{q}} \tanh \frac{\beta\omega_{\vec{q}}}{2}}$$



まとめ

- ボソン系の量子計算を念頭に、場の値の離散化の効果を評価
 - 古典計算機で**Markov-Chain Monte Carlo 計算**
 - 離散化した場の値 = a_{dig} の整数倍, カットオフ R 以内
 - 符号問題のない、効率的なサンプリング
 - デモンストレーション：
 - 1個の非調和振動子 (\rightarrow)
 - 2次元格子上的自由スカラー場
 - a_{dig} が小さくなるとともに**指数関数的なエラー減衰**
- カットオフ R が小さい場合の計算も容易
- 行列模型なども同様に計算可能

