

Importance Sampling を用いた Basis Quantum Monte Carlo 法の定式化

八 木 徹*

要 約

Basis Quantum Monte Carlo (BQMC) 法に対して Importance Sampling を導入した。Importance Sampling の重み関数としては通常の BQMC 法の結果から得られる波動関数を利用して定式化を行った。具体的な遷移確率として、拡散項とフェルミ孔項に Quantum force によるドリフト移動が反映され、分岐項には局所エネルギーが含まれる結果が得られた。さらに Importance Sampling を行う BQMC 法の繰り返しの式が得られた。この結果は、BQMC 法においてより高い精度で計算を行うための重要な基礎となる。

キーワード: 量子モンテカルロ法, Basis Quantum Monte Carlo, Importance Sampling

1. はじめに

分子の性質を理論的に考察する手法の一つとして、量子モンテカルロ法が利用されている。特に拡散量子モンテカルロ法はこれまでに様々な改良がなされ、多くの系に適用されてきた¹⁾。一方 Basis Quantum Monte Carlo (BQMC) 法は、拡散量子モンテカルロ法には無い様々な特徴・利点をもつ量子モンテカルロ法である²⁾⁻⁶⁾。しかし平均量の計算では分散が大きく、原子・分子の計算に適用するためには精度の改善が必要である⁵⁾。

一般の拡散量子モンテカルロ法では、モンテカルロ計算の効率を高め、平均量の分散を下げる手法として Importance Sampling が利用される。Importance Sampling は、あらかじめ仮定した重み関数を用いて、配置空間の重要な部分を重点的に効率よくサンプリングできるようにする手法である。一般の拡散量子モンテカルロ法では、この重み関数としてガイド関数が用いられる。したがって拡散量子モンテカルロ法においては、ガイ

ド関数は、(1)フェルミ粒子の反対称性問題をあつかうために節面を記述する目的と、(2)Importance Sampling での重み関数に用いる目的の二つに活用されている。

BQMC 法においては、フェルミ粒子の反対称性はガイド関数を用いずに自然な形で理論に反映されている。精度良いガイド関数を用意する計算は、一般的に非常に負荷の高いものとなる。このため、ガイド関数を用いずに反対称性が記述できることは BQMC 法の最も大きな利点の一つである。したがって、BQMC 法の計算精度向上の目的で、一般の拡散量子モンテカルロ法のようにガイド関数を必要とする Importance Sampling を実施することは BQMC 法の利点を損なう恐れがあった。このため Öksüz は、Stratified Sampling といった別の手法を利用することを提案している⁴⁾。しかし、Stratified Sampling を量子モンテカルロ計算に適用するためには、計算対象とする系の配置空間をどのように分割するべきかといった新たな問題を生じる。

BQMC 法のもう一つの大きな特徴として、モンテカルロ計算の結果から系の波動関数を求めることが可能であるという点がある。そこで筆者は、

2010 年 11 月 30 日受付

* 江戸川大学 情報文化科学科専任講師 情報化学

この BQMC 計算で得られる波動関数を用いて Importance Sampling を行うスキームを提案した⁶⁾。計算手順の概要を以下に示す。

1. 通常の BQMC 計算を実施
2. 1. の結果より波動関数を取得
3. 2. の波動関数をガイド関数として Importance Sampling 付きの BQMC 計算を実施
4. 3. の結果から波動関数を得る
5. 必要に応じて 4. の波動関数を新たなガイド関数とし, 3. と 4. を繰り返す
6. 十分に分散が小さくなったときに終了

このスキームを実施するためには, BQMC 計算の結果から波動関数を求める手法を確立し, この波動関数を重み関数とする Importance Sampling を BQMC 法に適用し, その定式化を行うことが必要となる。本論文では, 1次元の系に対する Importance Sampling 付き BQMC 法定式化の手順と結果を示し, 得られた式についての考察を行った。

2. 量子モンテカルロ法と Importance Sampling

一般的な拡散量子モンテカルロ法に対して Importance Sampling を導入する場合, まず始めに系の状態を次式で表す。

$$f(\mathbf{R}, t) = \Psi_T(\mathbf{R}) \Psi(\mathbf{R}, t) \quad (1)$$

ここで $\Psi_T(\mathbf{R})$ はガイド関数である。(1)式の $\Psi(\mathbf{R}, t)$ が Schrödinger 方程式の解となる時, $f(\mathbf{R}, t)$ は次の方程式の解となる^{7), 8)}。

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 f + \frac{1}{2} \nabla \cdot [\mathbf{F}_Q f] - (E_T - E_L) f \quad (2)$$

ここで $f(\mathbf{R}, t)$ を f と表記した。また, \mathbf{F}_Q は “Quantum force” と呼ばれ, 位置に依存する量であり, 次式で定義される。

$$\mathbf{F}_Q(\mathbf{R}) \equiv \nabla \ln |\Psi_T(\mathbf{R})|^2 = 2 \frac{\nabla \Psi_T(\mathbf{R})}{\Psi_T(\mathbf{R})} \quad (3)$$

さらに E_L も場所に依存する量であり, “局所エネルギー” と呼ばれ次式で定義される。

$$E_L(\mathbf{R}) \equiv \frac{\hat{H} \Psi_T(\mathbf{R})}{\Psi_T(\mathbf{R})} \quad (4)$$

ここで \hat{H} は系のハミルトニアンである。 Ψ_T が系の波動関数 (固有関数) である場合, (4)式は定数となりエネルギー固有値と一致する。方程式 (2)の右辺における各項はそれぞれ, 拡散・ドリフト・生成消滅を表わすものとなり, f の時間発展を記述する。

(2)式と等価な積分方程式は次式で得られる。

$$f(\mathbf{R}', t + \delta t) = \int d\mathbf{R} G(\mathbf{R}', \mathbf{R}, \delta t) f(\mathbf{R}, t) \quad (5)$$

ここで, $G(\mathbf{R}', \mathbf{R}, \delta t)$ はグリーン関数で, 時間間隔 δt の間に, \mathbf{R} から \mathbf{R}' へ遷移する際の遷移確率を与える。 δt を十分小さな時間間隔とし, \mathbf{F}_Q が一定と仮定した場合, グリーン関数 G は次式で表わされる。

$$\begin{aligned} G(\mathbf{R}', \mathbf{R}, \delta t) &= G_d G_b \\ G_d &= \frac{1}{2\pi\delta t^{3N/2}} \exp[-(\mathbf{R}' - \mathbf{R}'')/2\delta t] \\ &\quad \times \delta(\mathbf{R}'' - \mathbf{R} - (\delta t/2)\mathbf{F}_Q(\mathbf{R})) \\ G_b &= \exp[-\delta t((E_L(\mathbf{R}') - E_L(\mathbf{R}))/2 - E_T)] \end{aligned} \quad (6)$$

ここで G_d は拡散項 (diffusion) を表わし, Quantum force によるドリフト項を含める。また, G_b は分岐項 (branch) を表わす。

(6)式のグリーン関数を用いて Importance Sampling 付きの拡散量子モンテカルロ計算が実行される。重み関数として利用されるガイド関数 Ψ_T は Quantum force や局所エネルギーとして組み込まれている。Quantum force は, ガイド関数の値の大きい領域に粒子をドリフト移動させ

て集まりやすくする。さらに局所エネルギーの値の大きな領域では状態が生成しやすくなる。このようにして、ガイド関数で重みづけした配置空間の領域が重点的にサンプリングされるようになる。

3. BQMC 法への Importance Sampling の導入

本章では Importance Sampling 付きの BQMC 法の導出を行う。通常の BQMC 法との比較のため、Öksüz が行った BQMC 法の定式化の手順²⁾に従って展開を行う。始めに 1 粒子 1 次元の系における定式化を行い、次いで同じスピンをもつ 2 個のフェルミ粒子の系についての結果を示す。

3-1. 1 粒子 1 次元における定式化

1 粒子 1 次元の系における BQMC 法に対して Importance Sampling を導入する。通常の BQMC 法と同様に、空間は間隔 b の等間隔格子に分割し、格子点上の点 x_j を中心とした基底関数として以下を導入する。

$$\varphi_j(x) = \exp\left(\frac{-(x-x_j)^2}{2b^2}\right) \quad (7)$$

この基底関数を用いて系の波動関数を以下のように展開する。

$$\Psi(x) = \sum_j c_j \varphi_j(x) \quad (8)$$

ここで c は展開係数である。次にガイド関数として Ψ_T を

$$\Psi_T(x) = \sum_j c_j^T \varphi_j(x) \quad (9)$$

と置く。ここで c^T は事前の BQMC 計算で決定される定数となる。すなわち、このガイド関数は BQMC 計算から得られた波動関数ということになる。この BQMC 波動関数は、Importance Sampling の有無にかかわらず、BQMC 計算で得られる分布から展開係数を決めることで求めることができる。このガイド関数を用いて次式の f を定義する。

$$f(x, t) = \Psi_T(x) \Psi(x, t) \quad (10)$$

このとき、 f の時間依存性は $\Psi(x, t)$ からくるが、時間 t は離散的なモンテカルロ計算の時間ステップに置き換えられる。このため時間ステップを n として

$$f^{(n)}(x) = \Psi_T(x) \Psi^{(n)}(x) \quad (10')$$

と表記する。BQMC 計算の各時間ステップで変化する量は $\Psi^{(n)}$ の展開係数 c となる。

前章に示した積分方程式 (5) とグリーン関数の具体形である (6) 式を用い、Importance Sampling 付き BQMC 計算の時間発展を (10) 式の分布に対して書き下す。

まず始めに、時間ステップ n における波動関数 $f^{(n)} = \Psi_T \Psi^{(n)}$ に、分岐項 G_b を作用させる。

$$\begin{aligned} G_b f^{(n)}(x) &= G_b \Psi_T(x) \sum_j c_j^{(n)} \varphi_j(x) \\ &= \Psi_T(x) \sum_j G_b c_j^{(n)} \varphi_j(x) \\ &= \Psi_T(x) \sum_j c_j^{(n')} \varphi_j(x) \end{aligned} \quad (11)$$

$c^{(n)}$ は、 n ステップ目の繰り返し後に得られている展開係数である。各格子点 x_i 上において (11) 式を求めると以下の等式が得られる。

$$\Psi_T(x_i) \sum_j G_b c_j^{(n)} \varphi_j(x_i) = \Psi_T(x_i) \sum_j c_j^{(n')} \varphi_j(x_i) \quad (12)$$

これを行列の形式に直すと

$$\text{LWBc}^{(n)} = \text{WBc}^{(n')} \quad (13)$$

が得られる。ただし、各要素は次式で表される。

$$\begin{aligned} L_{ij} &= G_b(x_i) \delta_{ij} \\ W_{ij} &= \Psi_T(x_i) \delta_{ij} \\ B_{ij} &= \varphi_j(x_i) \end{aligned} \quad (14)$$

また、 $c^{(n)}$ と $c^{(n')}$ は展開係数の列ベクトルである。

次に拡散項の影響を求めるため G_d を作用させ、式 (5) の積分を実施する。この操作は以下の式で表される。

$$\int dx G_d(y, x) f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\delta t}} \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-(y-x - (\delta t/2)F_Q(x))^2/2\delta t] f(x) dx \quad (15)$$

(15)式は、時間 δt の間における、 x から y への粒子の移動を表わす。ここで F_Q を定数と仮定する。これは、微小な時間 ($\delta t \rightarrow 0$) においてのみ成立する条件となる。 F_Q を一定として(15)式の積分を実施すると、

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dx G_d(y, x) \Psi_T(x) \Psi^{(n)}(x) \\ &= \sum_j \left\{ c_j^{(n)} M_j(y) \frac{b}{\sqrt{2\delta t + b^2}} \right. \\ & \quad \left. \times \exp\left(-\frac{(y-x_j - (\delta t/2)F_Q(x_j))^2}{2(\delta t + b^2)}\right) \right\} \end{aligned} \quad (16)$$

となる。ここで、 M_j は次式となる。

$$\begin{aligned} M_j(y) &= \sum_m \left\{ c_m^T \exp\left(-\frac{(y-x_m - (\delta t/2)F_Q(x_m))^2}{2(\delta t + b^2)}\right) \right\} \\ & \quad \times \exp\left(-\frac{\delta t(x_m - x_j)^2}{2b^2(2\delta t + b^2)}\right) \end{aligned} \quad (17)$$

式(16)は、 δt (1ステップ分の時間) 後の状態を表すものであるから、時間ステップ $n+1$ の波動関数と等しくなる。このため、

$$\begin{aligned} & \sum_j \left\{ c_j^{(n)} M_j(y) \frac{b}{\sqrt{2\delta t + b^2}} \right. \\ & \quad \left. \times \exp\left(-\frac{(y-x_j - (\delta t/2)F_Q(x_j))^2}{2(\delta t + b^2)}\right) \right\} \\ &= \Psi_T(y) \sum_j c_j^{(n+1)} \varphi_j(y) \\ &= \Psi_T(y) \Psi^{(n+1)}(y) \end{aligned} \quad (18)$$

となる。ここで、あらためて y を x と置きなおし、(18)式を各格子点 x_i 上の値で表すと、座標 x_i 上の各点における等式として以下が得られる。

$$\begin{aligned} & \sum_j \left\{ c_j^{(n)} M_j(x_i) \frac{b}{\sqrt{2\delta t + b^2}} \right. \\ & \quad \left. \times \exp\left(-\frac{(x_i - x_j - (\delta t/2)F_Q(x_j))^2}{2(\delta t + b^2)}\right) \right\} \\ &= \Psi_T(x_i) \sum_j c_j^{(n+1)} \varphi_j(x_i) \end{aligned} \quad (19)$$

これを行列形式で表記すると、

$$\mathbf{Tc}^{(n)} = \mathbf{W}\mathbf{Bc}^{(n+1)} \quad (20)$$

となる。ここで T_{ij} は、

$$\begin{aligned} T_{ij} &= M_j(x_i) \frac{b}{\sqrt{2\delta t + b^2}} \\ & \quad \times \exp\left(-\frac{(x_i - x_j - (\delta t/2)F_Q(x_j))^2}{2(\delta t + b^2)}\right) \end{aligned} \quad (21)$$

である。式(13)と(20)を組み合わせることで、次式が得られる。

$$\mathbf{T}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{L}\mathbf{W}\mathbf{Bc}^{(n)} = \mathbf{W}\mathbf{Bc}^{(n+1)} \quad (22)$$

ここで $\mathbf{c}^{(n)}$ の代わりに繰り返しの作用を受ける状態ベクトルとして $\mathbf{d}^{(n)} = \mathbf{W}\mathbf{Bc}^{(n)}$ を定義する。さらに $\mathbf{U} = \mathbf{T}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{W}^{-1}$ とすると、Importance Sampling を行う BQMC 法の繰り返しの式は

$$\mathbf{U}\mathbf{Ld}^{(n)} = \mathbf{d}^{(n+1)} \quad (23)$$

となる。ただし、ここで \mathbf{B}^{-1} と \mathbf{W}^{-1} は常に存在するものと仮定している。

定義より $\mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{B} = \mathbf{T}$ であるから、

$$T_{ij} = \sum_k U_{ik} W(x_k) \exp[-(x_k - x_j)^2/2b^2] \quad (24)$$

と表わすことができる。(24)式より明らかなように、 T_{ij} を Ψ_T の重みつき基底関数で展開した際の展開係数が U_{ik} となる。 U_{ik} は、通常の BQMC 法における手法と同様に求めることが可能であり、その結果は

$$U_{ik} = \frac{b}{\sqrt{2\pi\delta t}} \exp\left(-\frac{(x_i - x_k - (\delta t/2)F_Q(x_k))^2}{2\delta t}\right) \quad (25)$$

となる。この U_{ik} は、一般的なドリフト付き拡散の遷移確率と同等の式となっている。また、この U_{ik} は規格化されており、

$$\begin{aligned} \sum_k U_{ik} &= \sum_i U_{ik} \\ &= \frac{b}{\sqrt{2\pi\delta t}} \sum_i \exp\left(-\frac{(x_i - x_k - (\delta t/2)F_Q(x_k))^2}{2\delta t}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(y - x_k - (\delta t/2)F_Q(x_k))^2}{2\delta t}\right) dy \\ &= 1 \end{aligned} \quad (26)$$

となる。ここで $b \rightarrow 0$ の極限を考え、和を積分に置き換えている。このように U_{ik} は規格化されているが、“Quantum force” の存在により中心がずれた Gauss 分布を与える。このため $U_{ik} \neq U_{ki}$ となっており、詳細釣り合いを満たさない。そこで一般化 Metropolis 法に従い、試行 $x_j \rightarrow x_i$ に対する採択基準 A_{ij} を以下のように定める。

$$A_{ij} = \min(1, q_{ij}) \quad (27)$$

$$q_{ij} = \frac{U_{ji} \rho_j}{U_{ij} \rho_i} \quad (28)$$

ここで ρ_i は、系の分布であるため、現在考慮している Importance Sampling 付き BQMC 法において正確には $\rho_i = f(x_i)$ となる。しかしここでは $\rho_i = |\Psi_T|^2$ を用いる。これは、ガイド関数が基底状態の波動関数と一致する極限 ($\Psi_T \rightarrow \Psi_0$) において正しい分布 $|\Psi_0|^2$ がサンプリングされることを示す。

一般化 Metropolis の採用/棄却を行った場合、実際には拡散しない粒子が発生することになる。このため、電子の拡散による平均移動距離が変化することとなる。時間 δt の間の通常拡散による平均移動距離は

$$\langle \delta r^2 \rangle = \delta t \quad (29)$$

である。しかし、ここでは採用された粒子のみが

移動することになるため、見かけ上の拡散時間を δt_a として、実際に移動した粒子の平均移動距離を以下のように表す。

$$\langle \delta r_{accepted}^2 \rangle = \delta t_a \quad (30)$$

これより δt_a は、

$$\delta t_a = \delta t \frac{\langle \delta r_{accepted}^2 \rangle}{\langle \delta r^2 \rangle} \quad (31)$$

と表すことができる。拡散過程の採用/棄却によって生じる見かけの時間ステップ間隔の変化を δt_a として計算し、拡散直後の分岐過程の中に反映させることとなる。

3-2. 2粒子1次元における定式化 (反対称性)

次に、2粒子1次元の系を考える。2個のフェルミ粒子は、同スピンをもつものとする。このような系では、通常の BQMC 法と同様に、反対称化した基底関数を導入する。この反対称化基底関数を用いて波動関数を次式で表す。

$$\Psi(x) = \sum_{i>j} c_{ij} [\varphi_i(x^{(1)}) \varphi_j(x^{(2)}) - \varphi_j(x^{(1)}) \varphi_i(x^{(2)})] \quad (32)$$

ここで $x^{(1)}$ と $x^{(2)}$ は、それぞれの粒子の座標を表す。格子の位置を表わす添え字と区別するために、粒子の番号を上付き文字で表している。和に関する順序付けは、通常の BQMC 法と同様に、 $-\infty < x^{(2)} < x^{(1)} < \infty$ となるようにとる。

ガイド関数 Ψ_T を

$$\Psi_T(x) = \sum_{m \sim n} c_{mn}^T [\varphi_m(x^{(1)}) \varphi_n(x^{(2)}) - \varphi_n(x^{(1)}) \varphi_m(x^{(2)})] \quad (33)$$

と置く。 C^T は波動関数の展開係数であり、事前の BQMC 計算で求められた定数である。また、和の添え字 $m \sim n$ は、「和の制限が導入される、ただし制限内容は他の展開式の条件に応じて定める。」という意味を示す。(33)式をガイド関数として、(10)式と同様に f を以下のように定義する。

$$f(x, t) = \Psi_T(x) \Psi(x, t) \quad (34)$$

(34)式においても、時間依存性は波動関数の展開

係数 C_{ij} に反映されるものとなる。

1 粒子の場合と同様に、 f_l に分岐項 G_b を作用させ、ついで拡散項 G_d を作用させて積分を実施する。これにより、一粒子の場合と同等の繰り返しの式として、

$$\mathbf{TB}^{-1}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{L}\mathbf{W}\mathbf{Bc}^{(n)} = \mathbf{W}\mathbf{Bc}^{(n+1)} \quad (35)$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{c}^{(n)}$ と $\mathbf{c}^{(n+1)}$ はそれぞれ、 n 及び $n+1$ ステップにおける展開係数の列ベクトルであり、 \mathbf{L} , \mathbf{W} , \mathbf{B} はそれぞれ以下で表される。

$$\begin{aligned} L_{kl,ij} &= G_b(x_i, x_j) \delta_{ik} \delta_{jl} \\ &= L_{kl} \\ W_{kl,ij} &= \Psi_T(x_i, x_j) \delta_{ik} \delta_{jl} \\ &= W_{kl} \\ B_{kl,ij} &= \varphi_i(x_k) \varphi_j(x_l) - \varphi_j(x_k) \varphi_i(x_l) \end{aligned} \quad (36)$$

また、 $T_{kl,ij}$ は

$$\begin{aligned} T_{kl,ij} &= \frac{b^2}{\sqrt{2\delta t + b^2}} \left\{ M_{ij}(k, l) E_{ij}^F E_{ij}^F \right. \\ &\quad - M_{ji}(k, l) E_{ij}^F E_{ji}^F \\ &\quad - M_{ji}(k, l) E_{ji}^F E_{ij}^F \\ &\quad \left. + M_{ij}(k, l) E_{ji}^F E_{ji}^F \right\} \end{aligned} \quad (37)$$

となる。ここで(37)式の各項は以下のように定義される。

$$E_{ab}^F = \exp\left(-\frac{(x_a - x_b - (\delta t/2)\mathbf{F}_Q^{(b)})^2}{2(2\delta t + b^2)}\right) \quad (38)$$

$$E_{ab}^0 = \exp\left(-\frac{(x_a - x_b)^2}{2(2\delta t + b^2)}\right) \quad (39)$$

$$M_{ab}(c, d) = \sum_{m \sim n} C_{mn}^T E_{cm}^F E_{ma}^0 E_{dn}^F E_{nb}^0 \quad (40)$$

ここで、(38)式の中の $\mathbf{F}_Q^{(b)}$ は、Quantum force であり、後述する(45)式で定義される。(40)式の和の記号 $m \sim n$ は、ガイド関数(33)式に由来するものである。1 粒子の場合と同様に \mathbf{U} を $\mathbf{U} =$

$\mathbf{TB}^{-1}\mathbf{W}^{-1}$, 状態ベクトルを $\mathbf{d}^{(n)} = \mathbf{W}\mathbf{Bc}^{(n)}$ と定義すると、Importance Sampling を行う BQMC 法の繰り返しの式は 1 粒子の場合と形式的に同じものが得られる。(35)式における \mathbf{T} は、重み \mathbf{W} と基底関数 \mathbf{B} に対する展開を行い、

$$T_{kl,ij} = \sum_{p, q} U_{kl,pq} W_{pq} B_{pq,ij} \quad (41)$$

と表わすことができる。1 粒子での展開式 (23) を用いて、(41)式の展開を書き下す。さらに、波動関数 Ψ の和の制限に依存して、ガイド関数 Ψ_T の和の制限 $m \sim n$ を以下のように定める。

- ・ $p < q$ の領域では、 Ψ_T の和は $m < n$ の範囲で実施する
- ・ $p > q$ の領域では、 Ψ_T の和は $m > n$ の範囲で実施する

このように定義することにより、反対称化された \mathbf{U} として

$$\begin{aligned} U_{kl,ij} &= \left(\frac{b^2}{2\pi\delta t} \right) \exp\left(-\frac{(x_k - x_i)^2}{2\delta t}\right) \exp\left(-\frac{(x_l - x_j)^2}{2\delta t}\right) \\ &\quad \times \left[1 - \exp\left(-\frac{(x_k - x_l)(x_i' - x_j')}{\delta t}\right) \right] \\ &\quad \times \delta(x_i' - x_i - (\delta t/2)\mathbf{F}_Q^{(i)}) \\ &\quad \times \delta(x_j' - x_j - (\delta t/2)\mathbf{F}_Q^{(j)}) \end{aligned} \quad (42)$$

が得られる。右辺は、各粒子の拡散項、フェルミ孔項、Quantum force によるドリフト項の各項の積で表わされている。ドリフト項を除くと、形式的には通常の BQMC 法と同じ式が得られている。したがって Importance Sampling 導入の効果はドリフト項として追加されていることとなる。これは、一般の拡散量子モンテカルロ法で、Importance Sampling 導入前後の遷移確率に現れる変化と同じものである。このため、(42)式は通常の BQMC 法に Importance Sampling を導入した遷移確率として妥当なものと考えられる。

ここで、和の制限が存在するために、(42)式の \mathbf{U} は規格化されていない。このため通常の BQMC 法と同様に \mathbf{U} の規格化因子 \mathbf{S} として、

$$S_{kl,pq} = \left(\sum_{k>l} U_{kl,ij} \right) \delta_{pk} \delta_{ql} \quad (43)$$

を定義する。(42)式の $U_{kl,ij}$ において, 初期座標 (x_i, x_j) にある粒子は, 拡散の前に Quantum force によるドリフト移動を生じることとなる。ドリフト移動後の座標をあらためて (x_a, x_b) と置くと, $U_{kl,ij}$ は $U_{kl,ab}$ で表わすことができる。このため, S は通常の BQMC 法と同様に計算を行い, $|x_a - x_b|$ の関数として利用することができる。この規格化因子 S を用いて, 繰り返しの式は

$$U' L' \mathbf{d}^{(n)} = \mathbf{d}^{(n+1)} \quad (44)$$

と表わされる。ただし, U' と L' はそれぞれ $U' = US^{-1}$, $L' = SL$ となる。 $U'_{kl,ij}$ は状態 ij と kl の間で非対称な遷移確率となっているため, 詳細釣り合いが成り立たない。このため, 一般化 Metropolis 法に基づく採用 / 棄却の採択を行う。採択の基準は, 1 粒子の場合における (27)式, 及び (28)式と同じものとなる。さらに, 見かけの時間ステップは, (31)式となり, 拡散過程後の採用 / 棄却で変化した見かけの時間ステップを, 直後の分岐過程に反映させることとなる。

(44)式が Importance Sampling を導入した BQMC 法の繰り返しの式である。これは形式的には通常の BQMC 法と同じものである。しかし, 状態間の遷移確率を表わす U は (42)式で与えられる。また, 分岐項は (36)式の L となる。これらの式を通常の BQMC 法の各式と比較すると, 遷移確率 U においては, Quantum force によるドリフト移動が発生し, 粒子が x_i から $x_i + (\delta t / 2) F_Q$ に移動している。このドリフト移動の効果は, 拡散項とフェルミ孔項の両方に表れていることがわかる。また, 分岐項には (6)式の G_b を通じて局所エネルギーが含まれることになる。

以上より, Importance Sampling 付きの BQMC 法において, 粒子は始めに Quantum force によるドリフト移動を生じて座標を変化させ, その後, 通常の BQMC 法と同様に拡散とフェルミ孔の評価を行うこととなる。さらに, 局所エネルギーに依存した生成消滅を行う。これらの Quantum force と局所エネルギーの効果により,

重点的なサンプリングが行われ, 効果的なモンテカルロ計算を実施することができる。

3. 各種パラメータの計算

Importance Sampling 付きの BQMC 法を実施する際に必要となる各種パラメータについて示す。Quantum force は, 以下の式で表される。

$$F_Q^{(i)} = F_Q^{(i)}(x_a, x_b) = 2 \frac{\frac{\partial}{\partial x_i} \Psi_T(x_a, x_b)}{\Psi_T(x_a, x_b)} \quad (45)$$

ただし i は a または b のいずれかの値をとるものとする。局所エネルギーは,

$$E_L = \frac{\hat{H} \Psi_T(x_a, x_b)}{\Psi_T(x_a, x_b)} = \frac{-\frac{1}{2} (\nabla_a^2 + \nabla_b^2) \Psi_T(x_a, x_b)}{\Psi_T(x_a, x_b)} + V(x_a, x_b) \quad (46)$$

となる。(45), (46)式ともに, ガイド関数 (33) を代入して微分を実行することで具体式を求めることができる。

4. まとめと今後の展望

本研究において, 1 次元のフェルミ粒子の系に対する BQMC 法に Importance Sampling を導入した。ガイド関数としては事前の BQMC 計算で得られる波動関数を用い, Importance Sampling 付きの BQMC 法における繰り返しの式を求めた。

得られた結果は, 拡散過程の遷移確率の中に Quantum force によるドリフト移動を含み, 分岐項に局所エネルギーが寄与するものであり, 一般的な拡散量子モンテカルロ法における Importance Sampling と同等の効果を表わしていた。これにより, BQMC 法においても,

Importance Sampling を用いた効率的なモンテカルロ計算が可能となり, より高い精度でエネルギー等の平均値を求めることが期待される。

今後は, 得られた式を用いたモンテカルロ計算実施のための実装を行い, 非相対論的な近似範囲で原子の計算を行う。

7. 参考文献

- 1) Lester W. A. Jr., *Recent Advances in Quantum Monte Carlo Method*, World Scientific (1997)
- 2) Öksüz I., *Arab. J. Sci. Eng.*, Vol. 9, No. 2, pp. 145-152 (1984)
- 3) Öksüz I., *Arab. J. Sci. Eng.*, Vol. 9, No. 3, pp. 239-249 (1984)
- 4) Öksüz I., *J. Chem. Phys.*, Vol. 81, No. 11, pp. 5005-5012 (1984)
- 5) Yagi T. and Nagashima U., *J. Comput. Chem. jpn*, Vol. 8, No. 3, pp. 119-126 (2009)
- 6) 八木 徹, 江戸川大学紀要『情報と社会』, 第 20 号, pp. 231-238 (2009)
- 7) Moskowitz J. W., Schmidt K. E., Lee M. A., and Kalos M. H., *J. Chem. Phys.*, Vol. 77, pp.349-355 (1982)
- 8) Reynolds P. J., Ceperley D. M., Alder B. J. and Lester W. A., *J. Chem. Phys.*, Vol. 77, pp.5593-5603 (1982)