

複素ランジュバン法による符号問題の解決と その適用範囲について

研究会「熱場の量子論とその応用」

2018年8月28日(火)～30日(木)

理化学研究所 大河内記念ホール

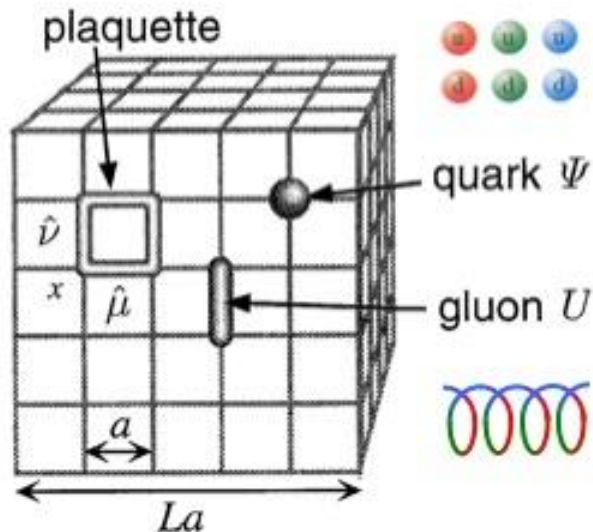
西村 淳 (KEK & 総研大)

モンテカルロ法における「符号問題」

- モンテカルロ法

場の量子論を**非摂動的**に研究するための強力な道具

例) 格子 QCD



$$\begin{aligned} Z &= \int dU d\Psi e^{-S[U, \Psi]} \\ &= \int dU e^{-S_g[U]} \det \mathcal{M}[U] \end{aligned}$$

この確率で配位 U を生成し、
 $\langle O \rangle$ を期待値として計算。

モンテカルロ法における「符号問題」

(続き)

- バリオン数密度が有限のとき ($\mu \neq 0$),

$$\begin{aligned} Z &= \int dU d\Psi e^{-S[U, \Psi]} \\ &= \int dU e^{-S_g[U]} \det \mathcal{M}[U] \end{aligned}$$

フェルミオン行列式が一般に複素数値をとる

$$\det \mathcal{M}[U] = |\det \mathcal{M}[U]| e^{i\Gamma[U]}$$

配位 U を $e^{-S_g[U]} |\det \mathcal{M}[U]|$ という確率で生成し、

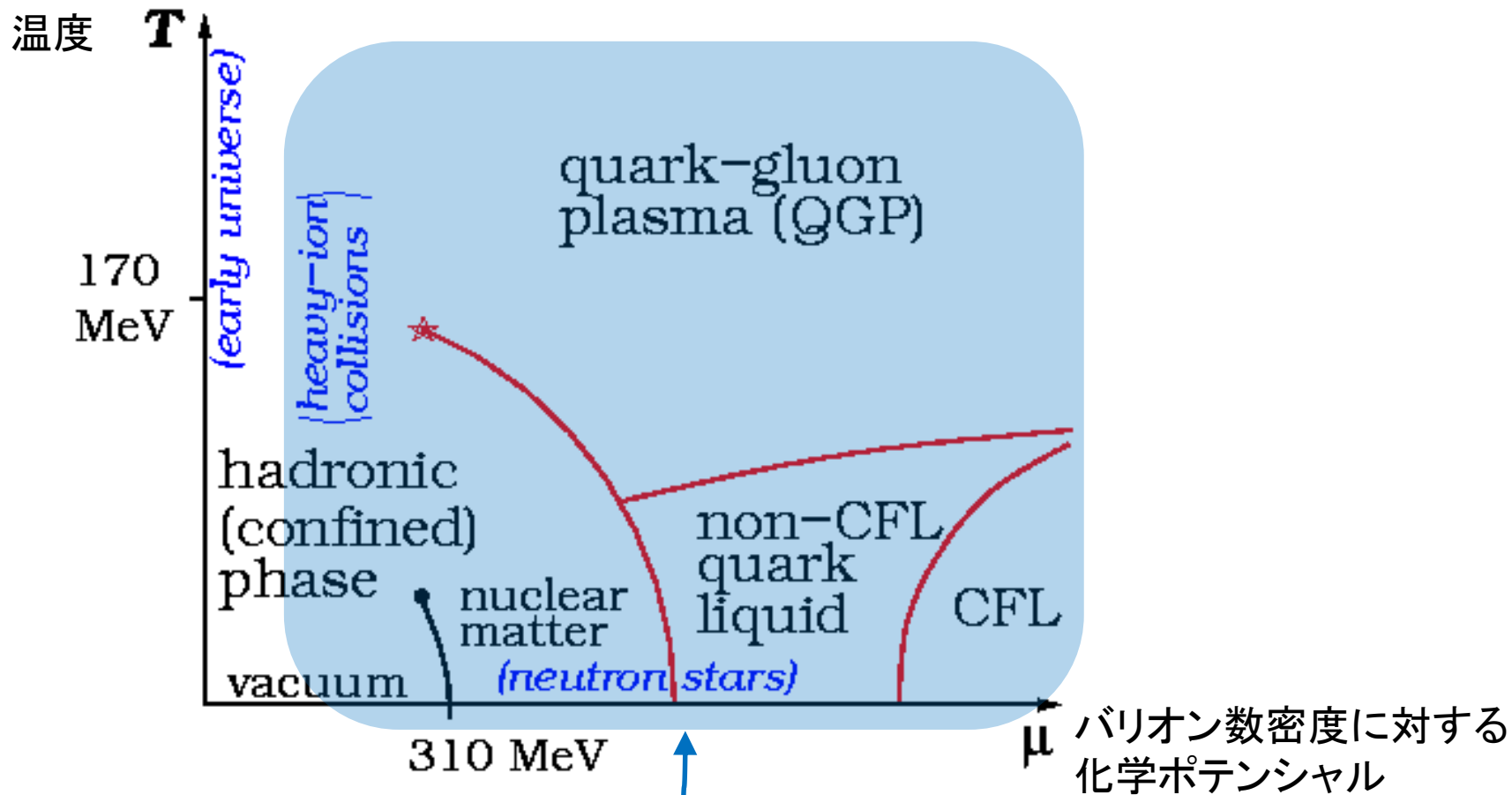
$$\langle \mathcal{O}[U] \rangle = \frac{\langle \mathcal{O}[U] e^{i\Gamma[U]} \rangle_0}{\langle e^{i\Gamma[U]} \rangle_0} \quad \text{を計算。 (reweighting)}$$

系の体積が大きくなると、指数関数的に小さくなる
(位相 Γ が激しく揺らぐため。)

期待値 $\langle \mathcal{O} \rangle$ を計算するのに必要な配位の数が、指数関数的に増大。

「符号問題」

QCD の相図は、謎に包まれている



符号問題のために、第一原理計算は困難。

符号問題は、他にも様々な興味深い系で起きる

- Θ 項
- Chern-Simons項
- 実時間のダイナミクス
- 湯川相互作用
- 超対称理論
- カイラル・フェルミオン
- 強相関電子系など

フェルミオンに起源
を持つケース

符号問題が解決できれば、理論物理学における
大きなブレークスルーになる！

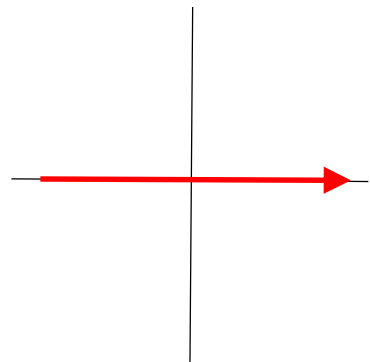
符号問題の解決に向けた新たな発展

2011～

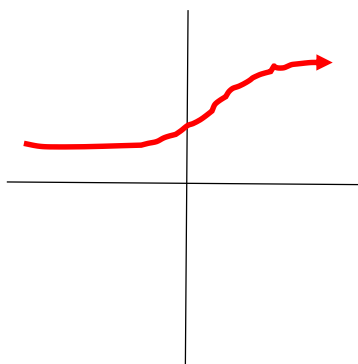
Key : 力学変数の複素化

もともとの経路積分

$$Z = \int dx w(x)$$



被積分関数 $w(x)$ の位相
が激しく振動 (符号問題)

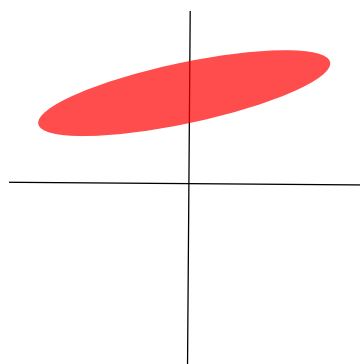


$$Z = \int dz w(z)$$

積分路を変形することにより、
符号問題を最小化する。

“Lefschetz thimble 法”

今日の話



複素化した変数に対する確率過程
のもとで、期待値を計算
(符号問題は一切なし!)

“複素ランジュバン法”

但し、もともとの経路積分との等価性には、
一定の条件が必要。

目次

- 0. 序
- 1. 複素ランジュバン法
- 2. 正当化の議論と正しい収束のための条件
- 3. 簡単な例でのデモンストレーション
- 4. ゲージ・クーリングとその正当化
- 5. 現実的なケースにおける成功例
- 6. まとめと展望

1. 複素ランジュバン法

複素ランジュバン法

$$Z = \int dx \, w(x)$$

複素

Parisi ('83), Klauder ('83)

力学変数を複素化して、(仮想的な)時間発展を考える

$$z^{(\eta)}(t) = x^{(\eta)}(t) + i y^{(\eta)}(t)$$

時間発展を定義する「複素ランジュバン方程式」

$$\frac{d}{dt} z^{(\eta)}(t) = v(z^{(\eta)}(t)) + \eta(t)$$

ガウス型のノイズ

probability $\propto e^{-\frac{1}{4} \sum_t \eta(t)^2}$

$$\langle \mathcal{O} \rangle \stackrel{?}{=} \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t)) \rangle_{\eta}$$

注：ドリフト項 $v(x) \equiv \frac{1}{w(x)} \frac{\partial w(x)}{\partial x}$ と オブザーバブル $\mathcal{O}(x)$ を、
複素変数に対して定義するには、解析接続を用いることが重要。

正当化の鍵となる恒等式

$P(x, y; t)$: 時刻 t における力学変数 $z = x + iy$ の確率

この方法を正当化する鍵となる恒等式:

$$\int dx dy \mathcal{O}(x + iy) P(x, y; t) \stackrel{?}{=} \int dx \mathcal{O}(x) \rho(x; t)$$

但し、 $\rho(x; t) \in \mathbb{C}$ は、Fokker-Planck方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{w(x)} \frac{\partial w(x)}{\partial x} \right) \rho \quad \text{を満たす。}$$

$$\Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \rho(x; t) = \frac{1}{Z} w(x)$$

holomorphy の役割

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, y; t) = L^\top P(x, y; t) \quad \dots\dots\dots P(x, y; t) \text{ の時間発展}$$

$$L = \left\{ \operatorname{Re} v(z) + \frac{\partial}{\partial x} \right\} \frac{\partial}{\partial x} + \operatorname{Im} v(z) \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x; t) = L_0^\top \rho(x; t) \quad \dots\dots\dots \rho(x; t) \text{ の時間発展}$$

$$L_0 = \left\{ v(x) + \frac{\partial}{\partial x} \right\} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\langle L \mathcal{O}, P \rangle = \langle \mathcal{O}, L^\top P \rangle$$

$$\langle L_0 \mathcal{O}, \rho \rangle = \langle \mathcal{O}, L_0^\top \rho \rangle$$

$$L \mathcal{O}(x + iy) = \left[\left\{ \operatorname{Re} v(z) + \frac{\partial}{\partial x} \right\} \frac{\partial}{\partial x} + \operatorname{Im} v(z) \frac{\partial}{\partial y} \right] \mathcal{O}(x + iy)$$

$$y = 0 \quad = \left\{ v(z) + \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{\partial}{\partial z} \mathcal{O}(z)$$

$$= \tilde{L} \mathcal{O}(z)$$

holomorphy

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &\mapsto \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} &\mapsto i \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$

$$\tilde{L} = \left\{ v(z) + \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{\partial}{\partial z}$$

$\mathcal{O}(z)$ と $v(z)$ の
holomorphy を使った

従来の議論

(Aarts, James, Seiler, Stamatescu: Eur. Phys. J. C ('11) 71, 1756)

$$\begin{aligned} & \int dx dy \mathcal{O}(x + iy) P(x, y; t) \\ &= \int dx dy \mathcal{O}(x + iy) (e^{tL^\top} P)(x, y; 0) \\ &= \int dx dy \left\{ e^{tL} \mathcal{O}(x + iy) \right\} P(x, y; 0) \\ &= \int dx \left\{ e^{tL_0} \mathcal{O}(x) \right\} \rho(x; 0) \\ &= \int dx \mathcal{O}(x) \rho(x; 0) (e^{tL_0^\top} \rho)(x; 0) \\ &= \int dx \mathcal{O}(x) \rho(x; t) \end{aligned}$$

$$P(x, y; 0) = \rho(x; 0) \delta(y)$$

$$L\mathcal{O}(z)|_{z=x} = L_0\mathcal{O}(x) \quad \text{for holomorphic function } \mathcal{O}(z)$$

ここで使う部分積分が必ずしも正当化できない。

我々の指摘: この表式が t 無限大では一般に well-defined ではない。

我々がやったこと

Nagata-J.N.-Shimasaki, Phys.Rev. D94 (2016) no.11, 114515,
arXiv: 1606.07627 [hep-lat]

“時間発展したオブザーバブル”の期待値が、十分長い時間に対しては ill-defined になりうることを指摘。

$$\begin{aligned} & \int dx dy \{ e^{\tau \tilde{L}} \mathcal{O}(x + iy) \} P(x, y; t) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \int dx dy \{ \tilde{L}^n \mathcal{O}(x + iy) \} P(x, y; t) \end{aligned}$$

この無限級数の収束半径は一般に無限大ではない。

実は、**ランジュバン時間に関する帰納法**を用いることにより、**有限の時間**に対して定義できていればよい。



従来指摘されていた「部分積分の問題」が起こらないための条件よりも僅かに強い条件を与える。

正しい収束のための「必要十分条件」が得られた。実用上も重要。

2. 正当化の議論と正しい収束のための条件

Ref.) Nagata-J.N.-Shimasaki, Phys.Rev. D94 (2016) no.11, 114515, arXiv: 1606.07627 [hep-lat]

「時間発展したオブザーバブル」の期待値が定義できるための条件

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t + \tau)) \rangle_\eta = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \tau^n \int dx dy \{ \tilde{L}^n \mathcal{O}(x + iy) \} P(x, y; t)$$

$$\tilde{L} = \left\{ v(z) + \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{\partial}{\partial z}$$

この表式が有限の τ に対して定義できるためには、上の無限級数が**有限の収束半径**を持つことが必要。

それには、ドリフト項の確率分布が大きい値に対して指数関数的に抑制されていることが必要。

「部分積分」を正当化するための条件

いったんランジュバン時間を離散化して、ステップ・サイズ ϵ を導入

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t + \epsilon)) \rangle_\eta = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \epsilon^n \int dx dy \{ : \tilde{L}^n : \mathcal{O}(x + iy) \} P(x, y; t)$$

$$\tilde{L} = \left\{ \underbrace{v(z)}_{\text{red circle}} + \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$:(f(x) + \partial)^2: = f(x)^2 + 2f(x)\partial + \partial^2$$

この積分の収束性は明らかでない !!!

ϵ 展開が正当化されるには、ドリフト項の確率分布が大きい値に対して、ベキ則よりも強く抑制されていないといけない。

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t + \epsilon)) \rangle_\eta = \int dx dy \{ (1 + \epsilon \tilde{L}) \mathcal{O}(x + iy) \} P(x, y; t) + O(\epsilon^2)$$

$\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとって、

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta = \int dx dy \{ \tilde{L} \mathcal{O}(x + iy) \} P(x, y; t)$$

部分積分が正当化できたことになる。

正しい収束のための条件

- ドリフト項の大きさの確率分布

$$p(u; t) = \int dx dy \delta(u - |v(z)|) P(x, y; t)$$

- n 次のモーメント $\int_0^\infty du u^n p(u; t)$ が有限であるためには、 $p(u; t)$ は大きな u に対してベキ則よりも速く落ちることが必要。

- 例えば $p(u; t) \sim e^{-\kappa u}$ であるならば、

$$\begin{aligned} \int_0^\infty du u^n p(u; t) &\sim \int_0^\infty du u^n e^{-\kappa u} \sim \frac{n!}{\kappa^{n+1}} \\ \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n!} \tau^n \int_0^\infty du u^n p(u; t) &\sim \frac{1}{\kappa} \sum_{n=0}^\infty \left(\frac{\tau}{\kappa}\right)^n \end{aligned}$$

収束半径は $\tau_{\text{conv}} \sim \kappa$ と評価できる。

必要十分条件

オブザーバブルの有限 t 発展



指数関数的に落ちることが必要

部分積分の有効性



ベキ則よりも速く落ちることが必要

鍵となる恒等式の証明

任意の k に対する以下の恒等式を t に関する帰納法で証明

$$\int dx dy \left\{ \tilde{L}^k \mathcal{O}(x + iy) \right\} P(x, y; t) = \int dx \left\{ (L_0)^k \mathcal{O}(x) \right\} \rho(x; t)$$

$$\tilde{L} = \left\{ v(z) + \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{\partial}{\partial z} ,$$

$$L_0 = \left(v(x) + \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial x}$$

$t=0$ では自明に満たされる。

$$P(x, y; 0) = \rho(x) \delta(y) ,$$

$$\rho(x; 0) = \rho(x)$$

ある t で満たされているとすると、 $\tau < \tau_{\text{conv}}$ に対して、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \tau^n \int dx dy \left\{ \tilde{L}^{n+k} \mathcal{O}(x + iy) \right\} P(x, y; t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \tau^n \int dx \left\{ (L_0)^{n+k} \mathcal{O}(x) \right\} \rho(x; t)$$

$$\begin{aligned} \int dx dy \left\{ \tilde{L}^k \mathcal{O}(x + iy) \right\} P(x, y; t + \tau) &= \int dx \left\{ e^{\tau L_0} (L_0)^k \mathcal{O}(x) \right\} \rho(x; t) \\ &= \int dx \left\{ (L_0)^k \mathcal{O}(x) \right\} e^{\tau (L_0)^\top} \rho(x; t) \\ &= \int dx \left\{ (L_0)^k \mathcal{O}(x) \right\} \rho(x; t + \tau) \end{aligned}$$

3. 簡単な例でのデモンストレーション

Ref.) Nagata-J.N.-Shimasaki, Phys.Rev. D94 (2016) no.11,
114515, arXiv: 1606.07627 [hep-lat]

3.1 ドリフト項が特異点を持つ模型

ドリフト項が特異点を持つ模型

$$Z = \int dx w(x) , \quad w(x) = (x + i\alpha)^p e^{-x^2/2}$$

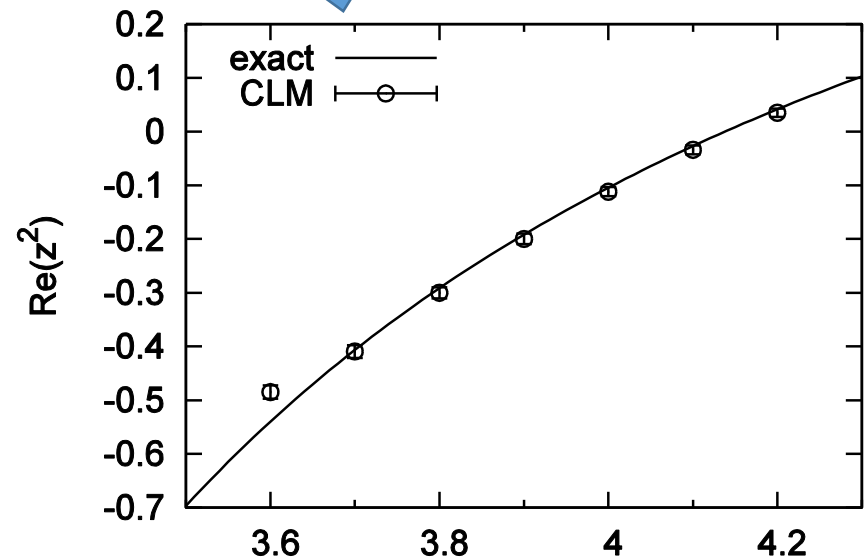
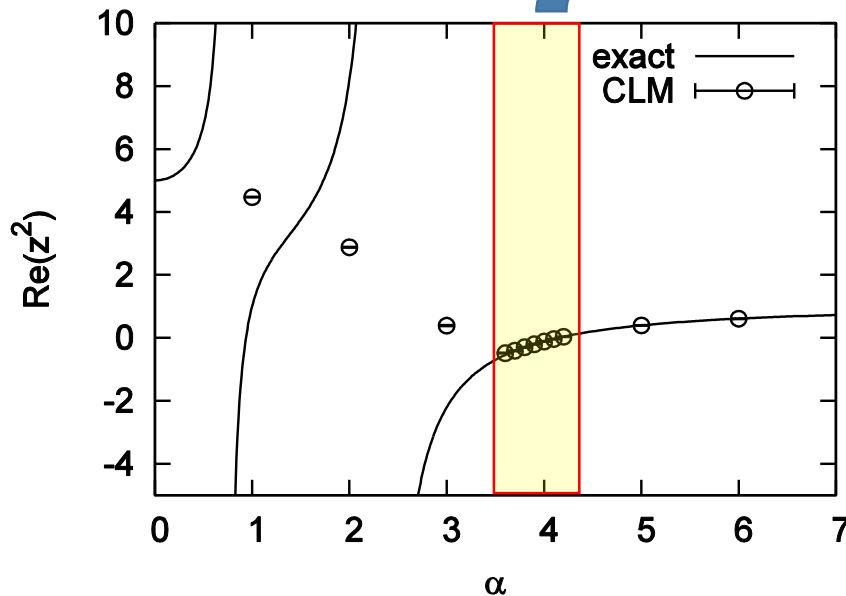
J.N.-Shimasaki, PRD 92 (2015) 1, 011501 arXiv:1504.08359 [hep-lat]

ドリフト項 : $v(x) = \frac{1}{w(x)} \frac{dw(x)}{dx} = \frac{p}{x + i\alpha} - x$ 解析接続 $\rightarrow$ $v(z) = \frac{p}{z + i\alpha} - z$

$z = -i\alpha$ に特異点

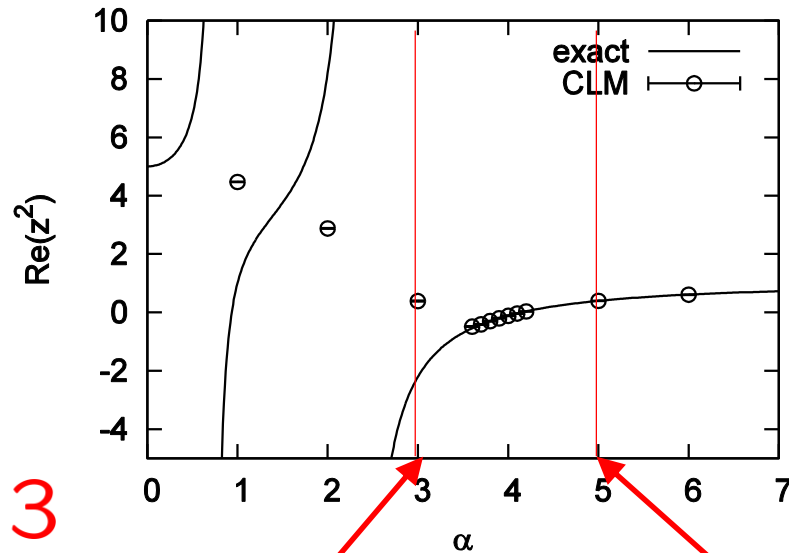
$p = 4$

この領域を拡大



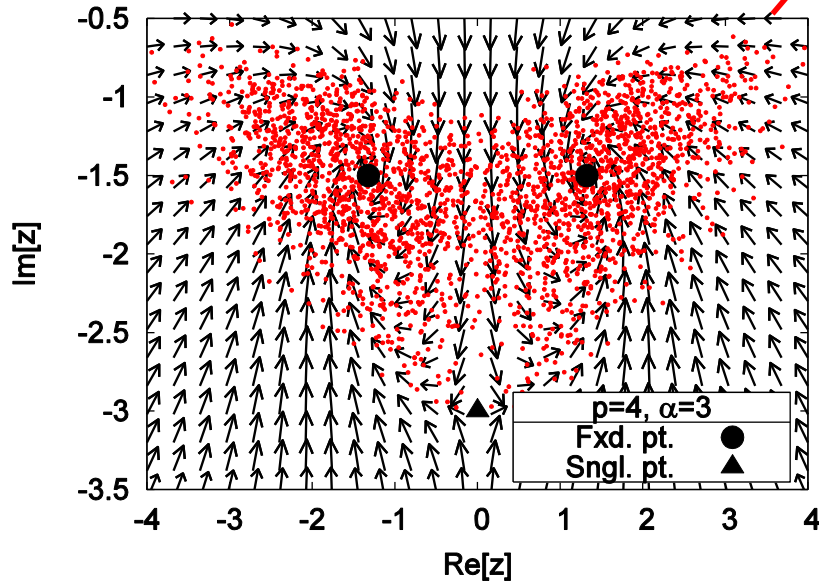
$\alpha \gtrsim 3.6$ で CLM は間違った結果を出す。

α が小さい領域で失敗する原因

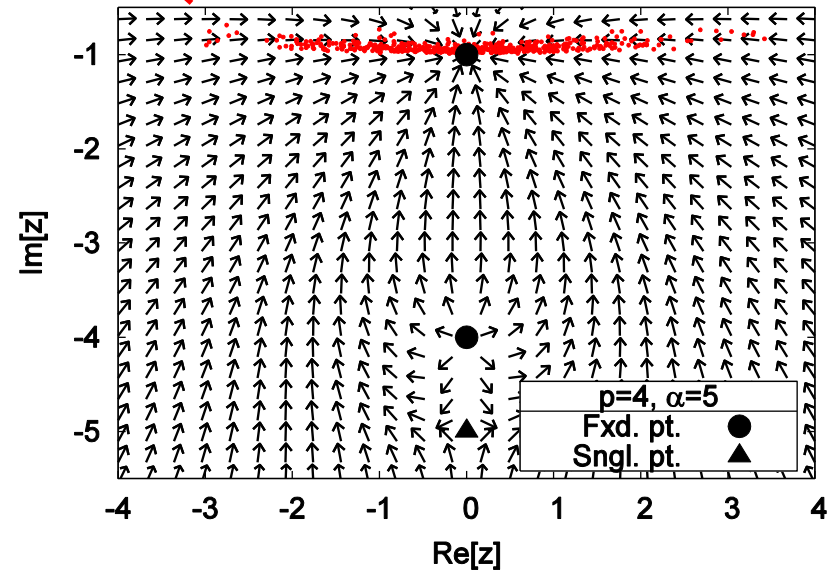


$\alpha = 3$

$\alpha = 5$

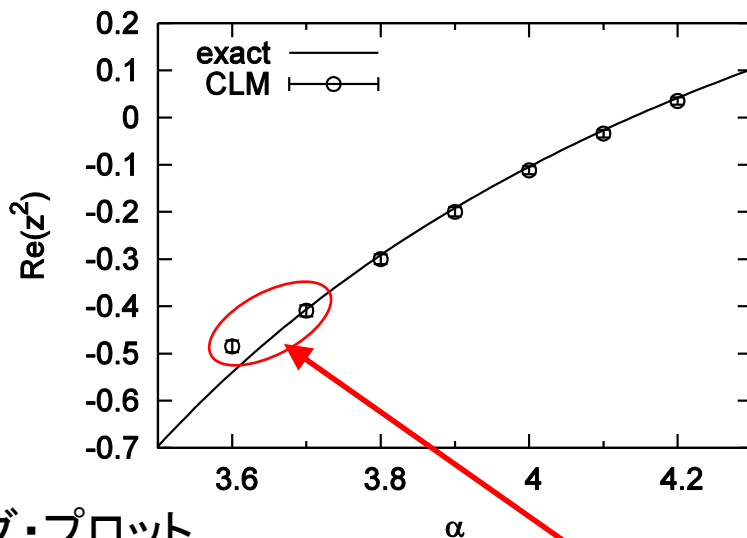


特異点付近に多くの配位が現れる。

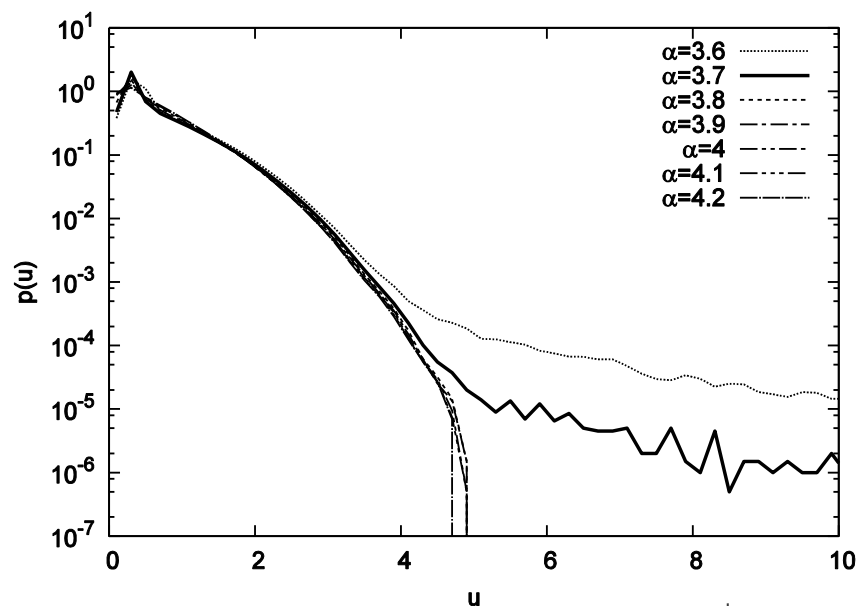


特異点付近には配位が現れない。

我々の条件のデモンストレーション

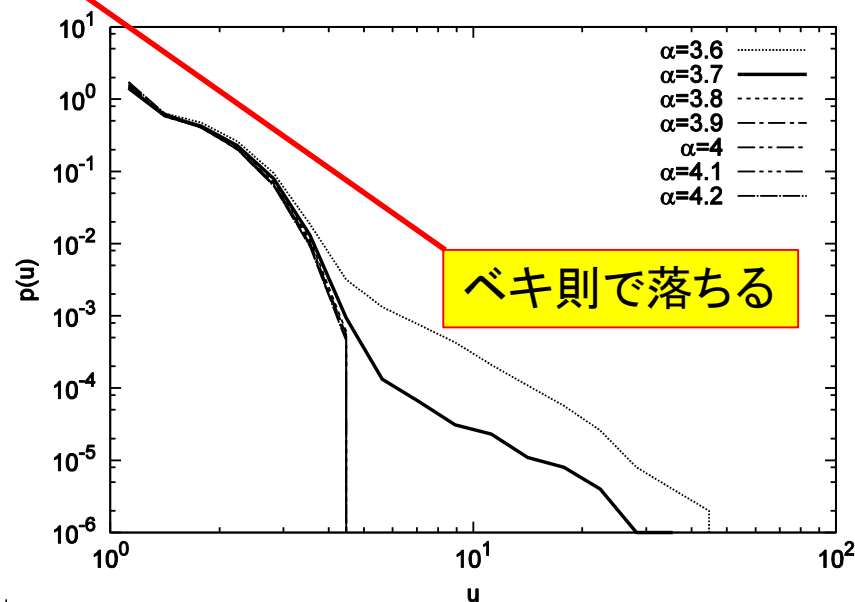


片ログ・プロット



ドリフト項の大きさ $u \equiv |v(z)| = \left| \frac{p}{z + i\alpha} - z \right|$

ログログ・プロット



の確率分布

3.2 「漂流」の可能性がある模型

「漂流」の可能性がある模型

$$Z = \int dx w(x) , \quad w(x) = e^{-\frac{1}{2}(A+iB)x^2 - \frac{1}{4}x^4}$$

Aarts-Giudice-Seiler ('13)

$$v(x) = \frac{1}{w(x)} \frac{dw(x)}{dx} = -(A + iB)x - x^3$$

解析接続

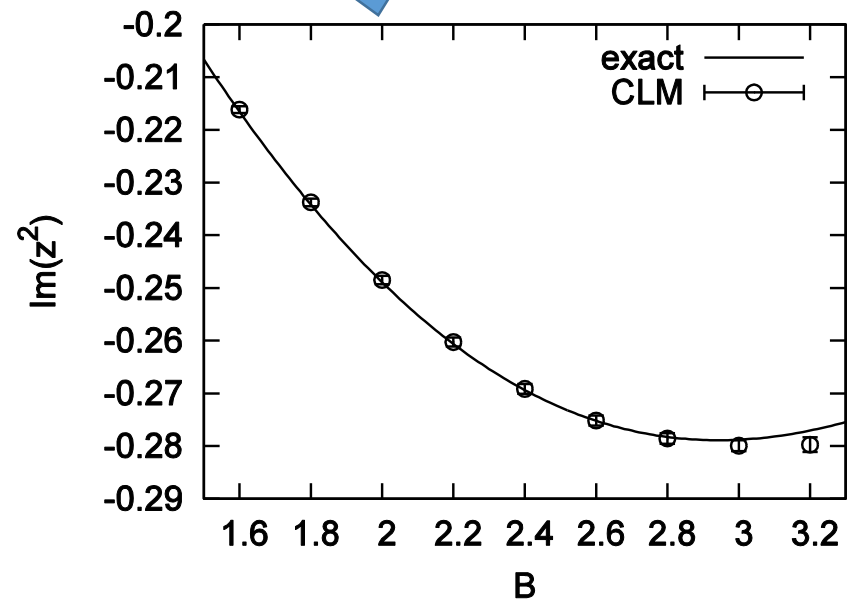
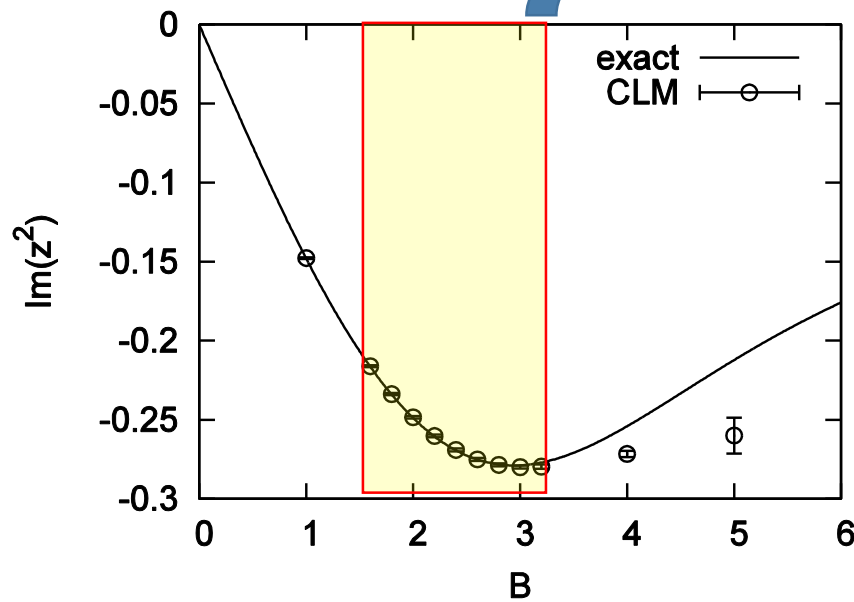


$$v(z) = -(A + iB)z - z^3$$

$|z|$ の大きい領域で漂流する
可能性あり。

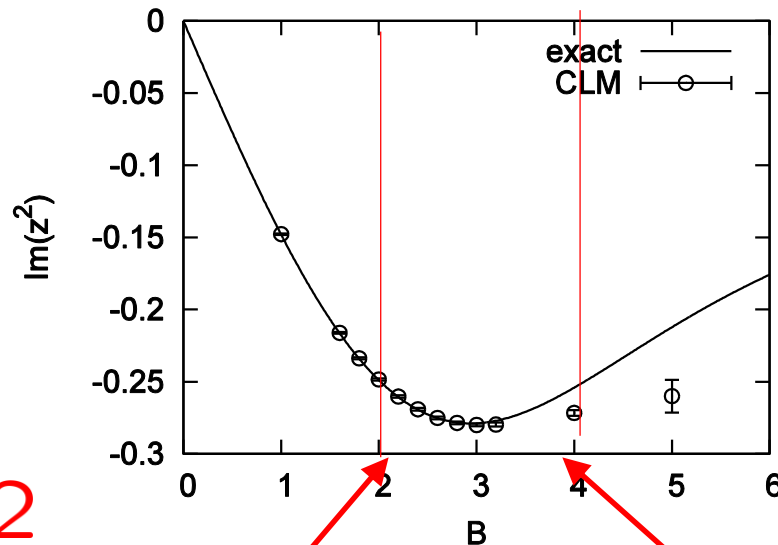
$A = 1$

この領域を拡大



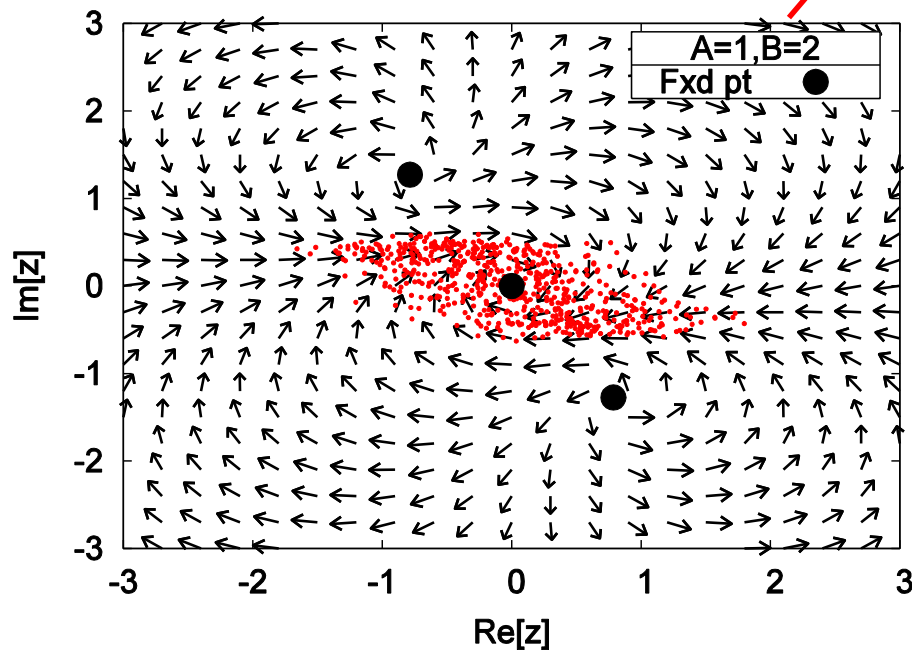
$B \gtrsim 3.0$ で CLM は間違った結果を出す。

B が大きい領域で失敗する原因

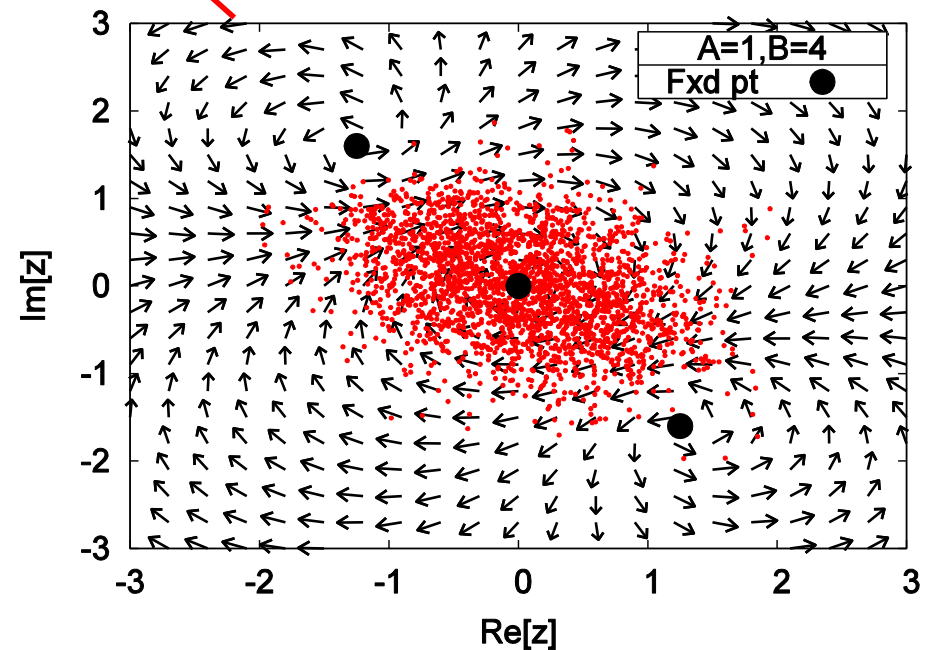


$B = 2$

$B = 4$

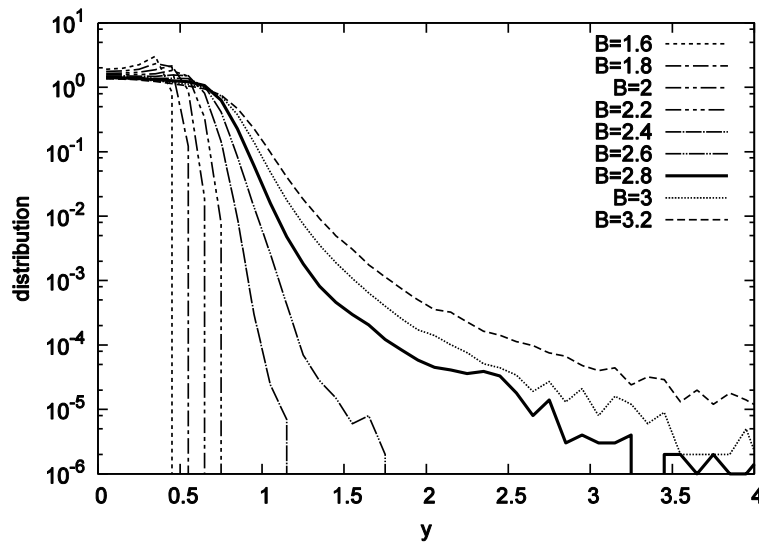
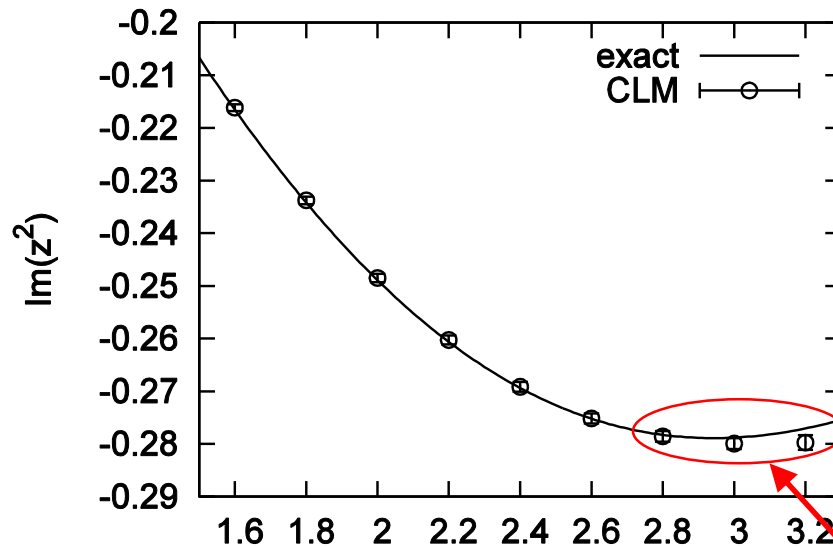


配位は $|y| < C$ という領域にしか現れない。

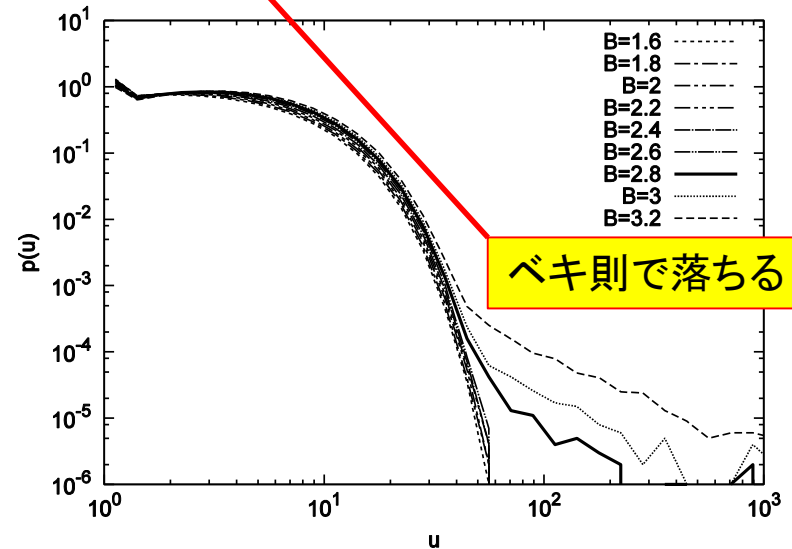


配位は $|y|$ の大きい領域に広がる。

我々の条件のデモンストレーション



B



ドリフト項の大きさ $u \equiv |v(z)| = |-(A + iB)z - z^3|$ の確率分布

これらの問題は有限密度QCDでも起こる

$$w(U) = e^{-S_{\text{plaq}}[U]} \det M[U]$$

$$S_{\text{plaq}}(U) = -\beta \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} \text{tr} (U_{n\mu} U_{n+\hat{\mu},\nu} U_{n+\hat{\nu},\mu}^{-1} U_{n\nu}^{-1})$$

SU(3)の生成子

$$v_{an\mu}(U) = \frac{1}{w(U)} D_{an\mu} w(U)$$

$$D_{an\mu} f(U) = \left. \frac{\partial}{\partial x} f(e^{ix t_a} U_{n\mu}) \right|_{x=0}$$

力学変数の複素化: $U_{n\mu} \mapsto \mathcal{U}_{n\mu} \in \text{SL}(3, \mathbb{C})$

離散化した複素ランジュバン方程式

$$\mathcal{U}_{n\mu}^{(\eta)}(t+\epsilon) = \exp \left\{ i \sum_a \left(\epsilon v_{an\mu}(\mathcal{U}) + \sqrt{\epsilon} \eta_{an\mu}(t) \right) t_a \right\} \mathcal{U}_{n\mu}^{(\eta)}(t)$$

ドリフト項が大きくなるのは以下のようなとき。

1) リンク変数 $\mathcal{U}_{n\mu}$ がユニタリ行列から著しくずれたとき。

「ゲージ・クーリング」を用いて、この問題を回避できる。

2) $M[\mathcal{U}]$ の固有値がゼロに近づくとき。

ドリフト項に $\text{tr} (M[\mathcal{U}]^{-1} D_{an\mu} M[\mathcal{U}])$ が現れることに注意。

4. ゲージ・クーリングとその正当化

Ref.) Nagata-J.N.-Shimasaki, PTEP 2016 (2016) no.1, 013B01 [arXiv:1508.02377 [hep-lat]]
連続のランジュバン方程式を用いた議論。

Nagata-J.N.-Shimasaki, Phys.Rev. D94 (2016) no.11, 114515, arXiv: 1606.07627 [hep-lat]
離散化したランジュバン方程式を用いた場合に拡張。

「ゲージ・クーリング」

Seiler-Sexty-Stamatescu, PLB 723 (2013) 213
arXiv:1211.3709 [hep-lat]

N個の実変数 x_k から成る系:

$$Z = \int dx w(x) = \int \prod_k dx_k w(x)$$
$$v_k(x) \equiv \frac{1}{w(x)} \frac{\partial w(x)}{\partial x_k}$$

ドリフト項 $v_k(z)$ とオブザーバブル $\mathcal{O}(z)$ の持つ対称性

$$x'_j = g_{jk} x_k$$



$$z'_j = g_{jk} z_k$$

力学変数の複素化に伴い対称性が増える

$g \in \text{complexified Lie group}$

ランジュバン過程を以下のように変更。

$$\tilde{z}_k^{(\eta)}(t) = g_{kl} z_l^{(\eta)}(t)$$

「ゲージ・クーリング」

$$z_k^{(\eta)}(t + \epsilon) = \tilde{z}_k^{(\eta)}(t) + \epsilon v_k(\tilde{z}^{(\eta)}(t)) + \sqrt{\epsilon} \eta_k(t)$$

「ゲージ・クーリング」の正当化

Nagata-J.N.-Shimasaki, Phys.Rev. D94 (2016) no.11, 114515,
1606.07627 [hep-lat]

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t + \epsilon)) \rangle_\eta = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \epsilon^n \int dx dy \left(: \tilde{L}^n : \mathcal{O}(z) \right) \Big|_{z^{(g)}} P(x, y; t)$$

$$z_k^{(g)} = g_{kl}(x, y) z_l$$

$$\left(: \tilde{L}^n : \mathcal{O}(z) \right) \Big|_{z^{(g)}} = : \tilde{L}^n : \mathcal{O}(z)$$



ゲージ・クーリングの影響はここだけ
複素化した対称性により効かない。

$$\left(\mathcal{O}(z) \text{ と } \tilde{L} = \left(v_k(z) + \frac{\partial}{\partial z_k} \right) \frac{\partial}{\partial z_k} \text{ は、複素化した対称性のもとで不変。} \right)$$

但し、 $P(x, y; t)$ はゲージ・クーリングの影響で変わること注意到。
ノイズ項が複素化した対称性のもとで共変的に変換しないため。

$$\text{probability} \propto e^{-\frac{1}{4} \sum_t \{ \frac{1}{N_R} \eta^{(R)}(t)^2 + \frac{1}{N_I} \eta^{(I)}(t)^2 \}}$$

この自由度を利用して、正しい収束のための条件を満たすことができる。

5. 現実的なケースにおける成功例

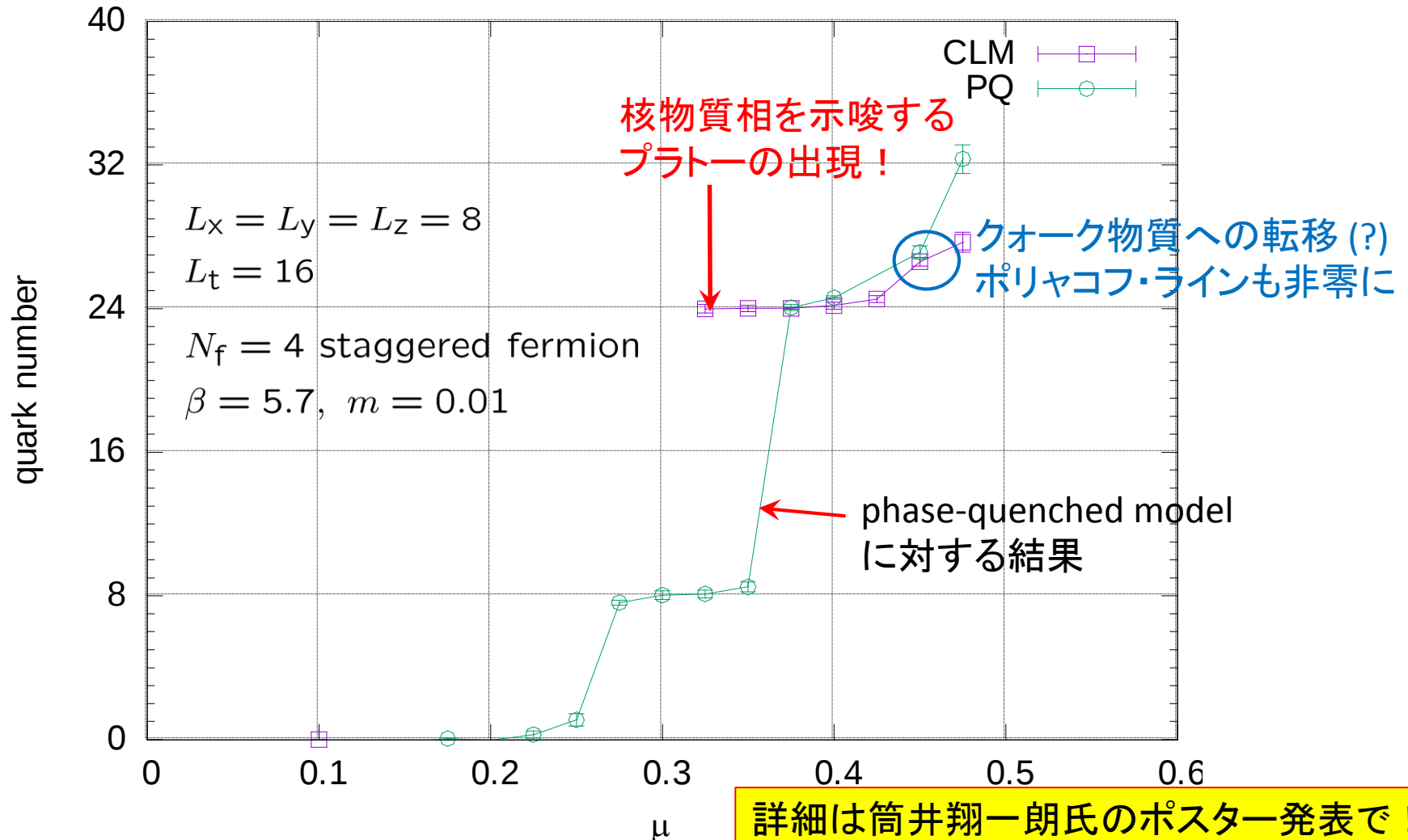
Ref.) Nagata-J.N.-Shimasaki : arXiv:1805.03964 [hep-lat]

Ito-Matsufuru-J.N.-Shimasaki-Tsuchiya-Tsutsui, work in progress

有限密度QCDへの応用

Nagata-J.N.-Shimasaki : arXiv:1805.03964 [hep-lat]

Ito-Matsufuru-J.N.-Shimasaki-Tsuchiya-Tsutsui, work in progress



6. まとめと展望

まとめ

- 複素ランジュバン法
符号問題に対する有望なアプローチ

この方法を正当化する議論が確立したことは重要。

正しい収束のための必要十分条件：

ドリフト項の確率分布が、大きい値において指数関数的に抑制されていること。

この条件が満たされていれば、オブザーバブルの有限 t 発展を議論の中で用いることができる。部分積分も正当化される。

- この議論の中に「ゲージ・クーリング」を取り入れることもできる。

特異ドリフト問題や漂流問題を回避することが可能。

- 有限密度QCDへの応用(4-flavor staggered fermion)で有望な結果。
(IKKT行列模型における回転対称性の自発的破れでも有望)。

今後の展望

- QCDの相図の探索

- 信頼に足る方法に基づく臨界終点の決定
(重イオン衝突実験において重要。)
- 大きい μ の領域で現れる核物質やクォーク液体
の状態方程式 (天体物理に対するインパクト)

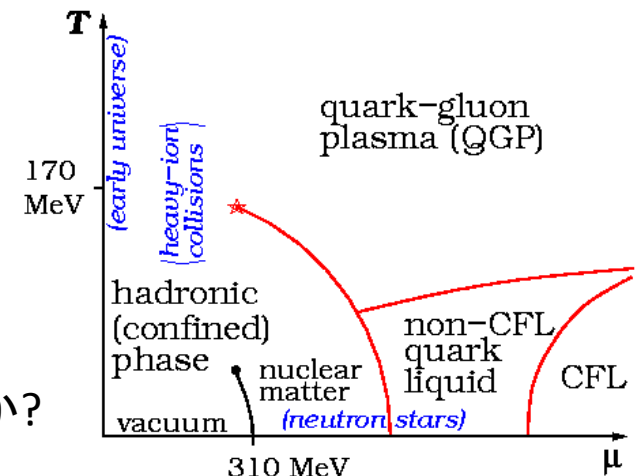
- 超弦理論の非摂動的定式化 (IKKT行列模型) で
 $SO(9, 1) \mapsto SO(3, 1)$ という自発的破れが起こるのか?

Ishibashi-Kawai-Kitazawa-Tsuchiya ('97)

- 以下にあげるものに手が届くようになる可能性あり。

既に論文あり

- Θ 項
- Chern-Simons 項
- 実時間のダイナミクス
- 湯川相互作用
- 超対称理論
- カイラル・フェルミオン
- 強相関電子系 など。



全く新しい理論物理学の世界が我々を待ち受けているのかもしれない！