焼き戻しレフシェッツ・シンブル法のカイラル行列模型への適用

松本信行 (京大理・D3)

2020.08.24 @熱場の量子論2020
福間将文氏、梅田直弥氏(PwC)との共同研究

[1] Fukuma-NM-Umeda, PRD100(2019)114510 [1906.04243], "Applying the tempered Lefschetz thimble method to the Hubbard model away from half filling"
[2] Fukuma-NM-Umeda, 1912.13303, "Implementation of the HMC algorithm on the tempered Lefschetz thimble method"
[3] Fukuma-NM-Umeda, in preparation
[4] Fukuma-NM, work in progress

要約

- 焼き戻しレフシェッツ・シンブル法(TLT法)：符号問題の解決に向けた有力なアルゴリズム [Fukuma-Umeda 1703.00861]
  ハバード模型への適用、および正確な推定を行うセルフチェックのアルゴリズムについては [1]
- TLT法へのハイブリッド・モンテカルロ法(HMC法)の実装により、メトロポリス法より効率的なサンプリングが可能になる
  注：レフシェッツ・シンブル法にHMC法を適用するのは我々が初めてではない。
  シンブル直上でのHMC法：[Fujii-Honda-Kato-Kikukawa-Komatsu-Sano 1309.4371]，フローで生成した曲面への一般化の提案：[Alexandru (LATTICE 2019)]
- カイラル行列模型（有限密度QCDのトイ・モデル）および三角格子上の反強磁性イジング模型（フラストレート系）に
  このアルゴリズムを適用した結果を示し、必要な計算コストについてコメントする

[A] 焼き戻しレフシェッツ・シンブル法

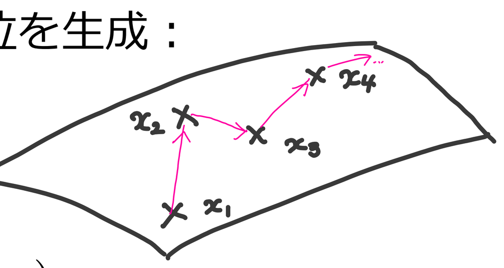
目的：経路積分で表された期待値の計算

$$\langle\mathcal{O}\rangle \equiv \frac{\int dx\, e^{-S(x)}\mathcal{O}(x)}{\underbrace{\int dx\, e^{-S(x)}}_{\equiv Z}}$$

$x(\in\mathbb{R}^N)$:力学変数
$S(x)$:作用
$\mathcal{O}(x)$:演算子

§ モンテカルロ法と符号問題

- (通常の)モンテカルロ法 [$S(x)\in\mathbb{R}^N$ の場合]
- $p(x)\equiv\frac{1}{Z}e^{-S(x)}$ を平衡分布に持つ確率過程を作り配位を生成：
  $\{x_1, x_2, \cdots, x_{N_{\rm conf}}\}$ [x_k: $p(x)$に従って選んだ配位]



- 生成した配位を用いて期待値を評価：

$$\langle\mathcal{O}\rangle = \int dx\, p(x)\mathcal{O}(x) \approx \underbrace{\frac{1}{N_{\rm conf}}\sum_{k=1}^{N_{\rm conf}}\mathcal{O}(x_k)}_{\text{推定値}} \underbrace{\pm O\left(\frac{1}{\sqrt{N_{\rm conf}}}\right)}_{\text{統計誤差}}$$

- 再重み付け法と符号問題
- $S(x)\in\mathbb{C}$ のときは $p(x)=\frac{1}{Z}e^{-S(x)}$ を確率分布とみなせない

素朴な対処法：再重み付け法（reweighting）

- アイデア：$e^{-S(x)} = \underbrace{e^{-{\rm Re}\,S(x)}}_{\text{重みに使う}}\underbrace{e^{-i{\rm Im}\,S(x)}}_{\text{演算子側に押し付ける}}$
- $$\langle\mathcal{O}\rangle = \frac{\int dx\, e^{-{\rm Re}\,S(x)}\cdot e^{-i{\rm Im}\,S(x)}\mathcal{O}(x)}{\int dx\, e^{-{\rm Re}\,S(x)}\cdot e^{-i{\rm Im}\,S(x)}} = \frac{\langle e^{-i{\rm Im}\,S(x)}\mathcal{O}(x)\rangle_0}{\langle e^{-i{\rm Im}\,S(x)}\rangle_0}$$
  ← 分母・分子を モンテカルロ法で評価
  $$\left(\langle f(x)\rangle_0 \equiv \frac{\int dx\, e^{-{\rm Re}\,S(x)}f(x)}{\int dx\, e^{-{\rm Re}\,S(x)}}\right)$$

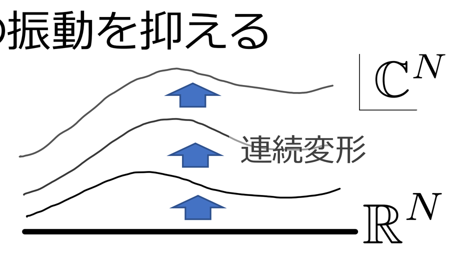
  $N\gg1$ で $e^{-i{\rm Im}\,S(x)}$ は激しい振動関数

  $$\approx \frac{e^{-O(N)}\pm O(1/\sqrt{N_{\rm conf}})}{e^{-O(N)}\pm O(1/\sqrt{N_{\rm conf}})}$$

  誤差を小さくする ⇒ $N_{\rm conf}=e^{O(N)}$：符号問題！
  i.e. 指数関数的

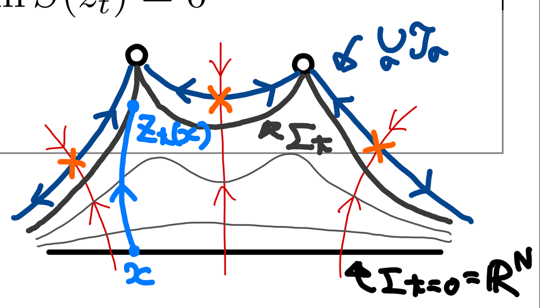
§ 焼き戻しレフシェッツ・シンブル法

- レフシェッツ・シンブル法 [Witten 1001.2933, Cristoforetti et al. 1205.3996, Alexandru et al. 1512.08764]
- アイデア：積分面を複素空間へ連続変形して、積分の振動を抑える
- 変数を複素化：$x\in\mathbb{R}^N \to z\in\mathbb{C}^N$
  積分面を連続変形：$\mathbb{R}^N \to \Sigma_t \equiv z_t(\mathbb{R}^N)$
  t：変形のパラメーター ("フロー時間")



ここで、フロー $x\to z_t(x)$ は(反正則な)グラディエントフロー：

- フロー方程式 $\begin{cases}\frac{d}{dt}z_t = [\partial S(z_t)]^* \\ z_{t=0}=x\end{cases}$
- フローの性質
  (i) $\frac{d}{dt}S(z_t) = |\partial S(z_t)|^2 \geq 0$ ⇒ ・等号成立は臨界点上のみ $\overset{\rm def}{\Longleftrightarrow} z_\sigma$ s.t. $\partial S(z_\sigma)=0$
  chain rule
  ・$z\neq z_\sigma$ では $\begin{cases}\frac{d}{dt}{\rm Re}\,S(z_t)>0\\ \frac{d}{dt}{\rm Im}\,S(z_t)=0\end{cases}$
  (ii) $\Sigma_t \equiv z_t(\mathbb{R}^N) \xrightarrow{t\to\infty} \cup_\sigma \mathcal{J}_\sigma$
  $\mathcal{J}_\sigma$: レフシェッツ・シンブル
  $\forall z\in\mathcal{J}_\sigma$, ${\rm Im}\,S(z)={\rm Im}\,S(z_\sigma)$ (= const.)



以下では $e^{-S(z)}\mathcal{O}(z)$, $e^{-S(z)}$は$\mathbb{C}^N$上の整関数とする。
このとき、

e.g. $\int_{\mathbb{R}^N}dx\, e^{-S(x)}\mathcal{O}(x) \overset{\text{コーシーの定理}}{=} \int_{\Sigma_t}dz\, e^{-S(z)}\mathcal{O}(z)$

⇒ 十分大きな t に対してΣ_t上で積分すれば符号問題は解消されることが期待

- 期待値の書き換え

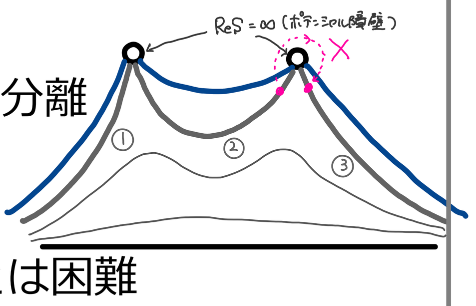
$$\int_{\Sigma_t}dz\, e^{-S(z)} = \int_{\Sigma_t}\underbrace{\boxed{|dz|}}_{\text{実の測度}}\frac{dz}{|dz|}\underbrace{\boxed{e^{-{\rm Re}S(z)}}}_{\text{実の重み}}e^{-i{\rm Im}S(z)} \left(=\int_{\mathbb{R}^N}dx\left|\det\left(\frac{\partial z_t(x)}{\partial x}\right)\right|e^{-{\rm Re}S(z_t(x))}e^{i\theta(z_t(x))}\right)$$

$\frac{\partial z_t(x)}{\partial x} = J_t(x)$

演算子側に押し付ける位相因子 ($\equiv e^{i\theta(z)}$)

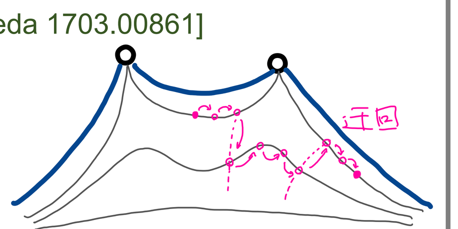
$$\langle\mathcal{O}\rangle = \frac{\int_{\Sigma_t}dz\, e^{-S(z)}\mathcal{O}(z)}{\int_{\Sigma_t}dz\, e^{-S(z)}} = \frac{\langle e^{i\theta(z)}\mathcal{O}(z)\rangle_{\Sigma_t}}{\langle e^{i\theta(z)}\rangle_{\Sigma_t}} \qquad \left(\langle f(z)\rangle_{\Sigma_t} \equiv \frac{\int_{\Sigma_t}|dz|\,e^{-{\rm Re}\,S(z)}\cdot f(z)}{\int_{\Sigma_t}|dz|\,e^{-{\rm Re}\,S(z)}}\right)$$

- レフシェッツ・シンブル法の問題点（エルゴード性の問題）
- $e^{-S(z)}$の零点があると (e.g.$^\exists$フェルミオン行列式)、
  $\Leftrightarrow \{z\in\mathbb{C}^N|{\rm Re}\,S(z)=\infty\}$
  t 大で Σ_t は $e^{-S(z)}$ の零点で隔てられた複数の連結部分に分離



- Σ_t 全体で積分しないと正しい値にはならないが、
  確率過程で ${\rm Re}\,S(z)=\infty$ のポテンシャル障壁を越えることは困難
  ⇒ 誤った評価につながるため、
  (このままでは) tを任意に大きくすることはできない

- 焼き戻しレフシェッツ・シンブル法(TLT法) [Fukuma-Umeda 1703.00861]
- アイデア：t 方向にも確率過程を補助的に行うことで、
  エルゴード性の問題が起きていないΣ_tを
  経由して隣の連結部分へ遷移できるようにする



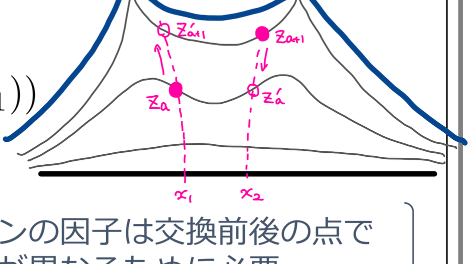
tによる並列焼き戻し(parallel tempering) 並列焼き戻し: Swendensen-Wang (1986), Geyer (1991), Hukushima-Nemoto (1996)

複数のΣ_tを用意し: $\{\Sigma_{t_a}\}_{a=0,\cdots,A}$ ($\Sigma_{t_0}=\mathbb{R}^N$, $t_0=0<t_1<\cdots<t_A$)、
$\prod_a\Sigma_{t_a}=\{z_0,\cdots,z_A\}_{z_a\in\Sigma_{t_a}}$ で平衡分布$\propto\prod_a|dz_a|e^{-{\rm Re}\,S(z_a)}$ を実現する:

- 各Σ_t上での遷移の後、隣のΣ_tと配位の交換を提案：
  $(z_a=z_{t_a}(x_1), z_{a+1}=z_{t_{a+1}}(x_2)) \to (z'_a=z_{t_a}(x_2), z'_{a+1}=z_{t_{a+1}}(x_1))$
- 提案を次の確率でアクセプト：

$$\min\left(\frac{|\det J_{t_a}(x_2)||\det J_{t_{a+1}}(x_1)|e^{-{\rm Re}S(z'_a)-{\rm Re}S(z'_{a+1})}}{|\det J_{t_a}(x_1)||\det J_{t_{a+1}}(x_2)|e^{-{\rm Re}S(z_a)-{\rm Re}S(z_{a+1})}}\right)$$

← ヤコビアンの因子は交換前後の点で体積要素が異なるために必要



⇒ TLT法は符号問題とエルゴード性の問題を同時に解決できる
ハバード模型への適用、および正確な推定を行うためのセルフチェックのアルゴリズムについては [1]

[B] Σ_t 上のハイブリッド・モンテカルロ法 (HMC法) [2]

要約の注でも述べた通り、レフシェッツ・シンブル法にHMC法を適用するのは我々が初めてではない。
我々の成果は (1) $e^{-S(z)}$ の零点の対処法の提案, (2)TLT法の並列焼き戻しと整合的な実装である。

§ HMCのアルゴリズム

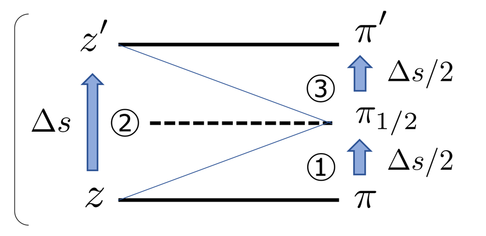
- 概要
  (i) πをガウシアン $\propto e^{-\frac{1}{2}|\pi|^2}$ で生成：
  (ii) 離散化したハミルトン方程式を解く：

Σ_t上の正準構造を保った離散化（RATTLE） [Andersen (1983), Leimkuhler-Skeel (1994)]

$$\begin{cases}①:\ \pi_{1/2} = \pi - \frac{\Delta s}{2}\,\partial V(z) - \lambda\cdot\partial\phi(z)\\ ②:\ z' = z + \Delta s\,\pi_{1/2}\\ ③:\ \pi' = \pi_{1/2} - \frac{\Delta s}{2}\,\partial V(z') - \lambda'\cdot\partial\phi(z')\end{cases}$$

$z\in\Sigma_t \Leftrightarrow \phi^\alpha(z)=0\ (\alpha=1,\cdots,N)$

λ,λ' は拘束条件から決定：$\begin{cases}④:\ \lambda \longleftarrow z'\in\Sigma_t\\ ⑤:\ \lambda' \longleftarrow \pi'\in T_{z'}\Sigma_t\end{cases}$



(iii) メトロポリス・テスト：得られた z'を確率 $\min\left(1, e^{-H(z',\pi')+H(z,\pi)}\right)$ でアクセプト
リジェクトされた場合は元の点を用いる (i.e. $z'=z$)

(i)~(iii)を繰り返し、$\propto e^{-{\rm Re}S(z)}$に従う z を生成する
(時間反転対称性 $(z,\pi)\to(z',\pi')\Rightarrow(z',-\pi')\to(z,-\pi)$と $(z,\pi)\to(z',\pi')$が正準変換より詳細釣り合いの式が従う)

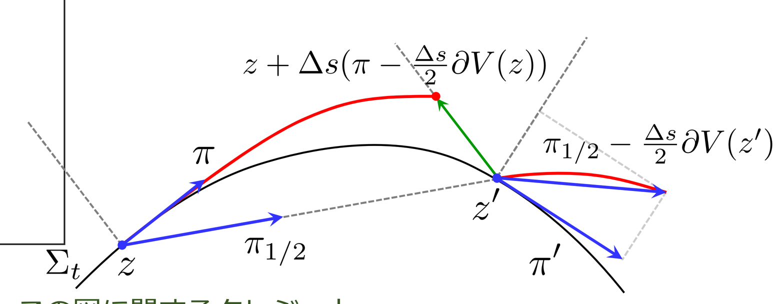
- 拘束条件④,⑤の解き方について [cf. Fujii-Honda-Kato-Kikukawa-Komatsu-Sano 1309.4371]
- ポイント：$\phi(z)$ の関数形は未知だが、「接空間」(および法空間)はフローのヤコビ行列 $J_t(x)=\frac{\partial z_t(x)}{\partial x}$ からわかる

$J_t(x)$ のフロー方程式
$\begin{cases}J_t(x) = \left[\frac{\partial^2 S(z_t(x))}{\partial z\partial z}\cdot J_t(x)\right]^*\\ J_{t=0}(x)=\mathbf{1}_N\end{cases}$ ⇐ x 微分 $\begin{cases}\frac{d}{dt}z_t = [\partial S(z_t)]^*\\ z_{t=0}=x\end{cases}$

- ④,⑤は次のように書き換えて解くことができる：

④: 次の方程式における $u,\lambda\in\mathbb{R}^N$ の解を見つける：
$$z_t(x+u) - z_t(x) - \Delta s\,\pi + \frac{\Delta s^2}{2}\,\partial V(z) + \lambda\cdot\partial\phi(z) = 0$$
これはニュートン法を用いて実行可能。

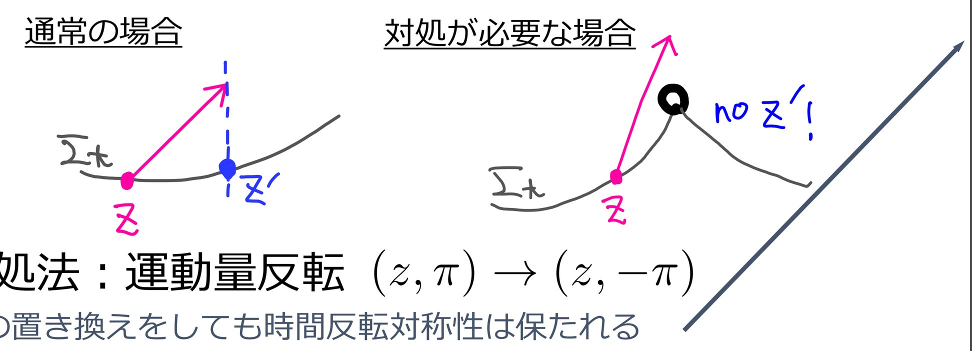
⑤: $\pi' = J_t(x')\cdot{\rm Re}\left[J_t^{-1}(x')\cdot\left(\pi_{1/2}-\frac{\Delta s}{2}\,\partial V(z')\right)\right]$



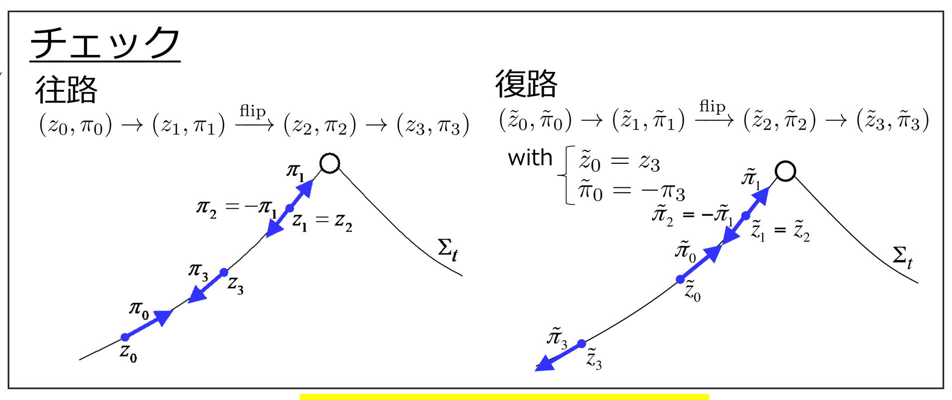
この図に関するクレジット:
[Alexandru (LATTICE 2019)]

§ $e^{-S(z)}$の零点の対処法 [2]

- HMCではハミルトン方程式を離散化して解くため
  z'を zと同じ連結部分上に取れないことがある：



- 対処法：運動量反転 $(z,\pi)\to(z,-\pi)$
  この置き換えをしても時間反転対称性は保たれる



⇒ ハバード模型 $N=20$ の場合にはメトロポリス法と比較して全体の計算コストが約30%になる
大自由度では、さらなる効率化が期待できる

[C] カイラル行列模型への適用 [3]

§ カイラル行列模型 [簡単のため1フレーバー]

- 有限密度QCD分配関数の非対角部分の行列 $\sigma_\mu(\partial_\mu+A_\mu)$ (時空の足を含む)を、ガウシアンのランダム行列 $iW\in M_{N_m}(\mathbb{C})$ [$N_m\propto V$] で置き換えた模型：
  [Jackson-Verbaarschot 9509324, Stephanov 9604003, Halasz et al. 9804290]

$$Z_{\rm QCD} \equiv \int[dA]\,e^{\int\frac{1}{2g^2}{\rm tr}F_{\mu\nu}^2}\det\begin{bmatrix} m & \sigma_\mu(\partial_\mu+A_\mu)+\mu\\ [\sigma_\mu(\partial_\mu+A_\mu)+\mu]^\dagger & m\end{bmatrix}$$

$$⇒\ Z_{\rm ChRM} \equiv \int(d^2W)\,e^{-N_m{\rm tr}W^\dagger W}\det\begin{bmatrix} m & iW+\mu+iT\eta\\ iW^\dagger+\mu+iT\eta & m\end{bmatrix} \qquad \left[\eta\equiv\begin{bmatrix}1_{N_m/2} & 0\\ 0 & -1_{N_m/2}\end{bmatrix}\right]$$

↖ 有限温度効果(T)はWへの補正項として取り入れている

- カイラル凝縮

$$\langle\bar\psi\psi\rangle \equiv -\frac{1}{N_m}\frac{\partial}{\partial m}\log Z_{\rm ChRM}$$

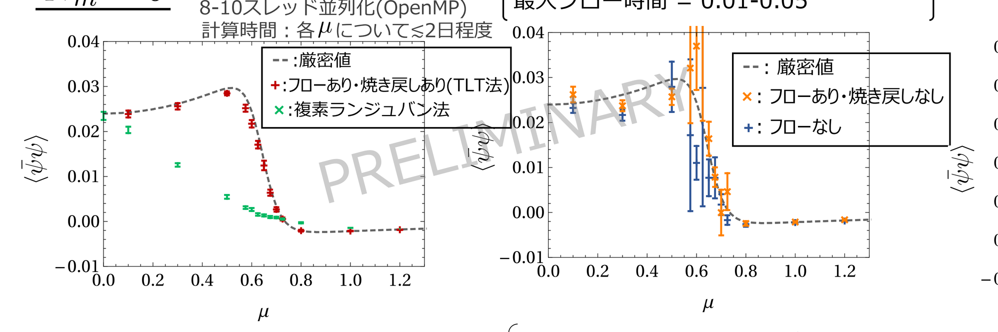
($N_m\to\infty$ では、$\mu=0$, $T=0$ において$m=0$ でも$\langle\bar\psi\psi\rangle\neq0$であり、有限温度・有限密度QCDと同様のカイラル相転移を持つ)

§ TLT法の適用

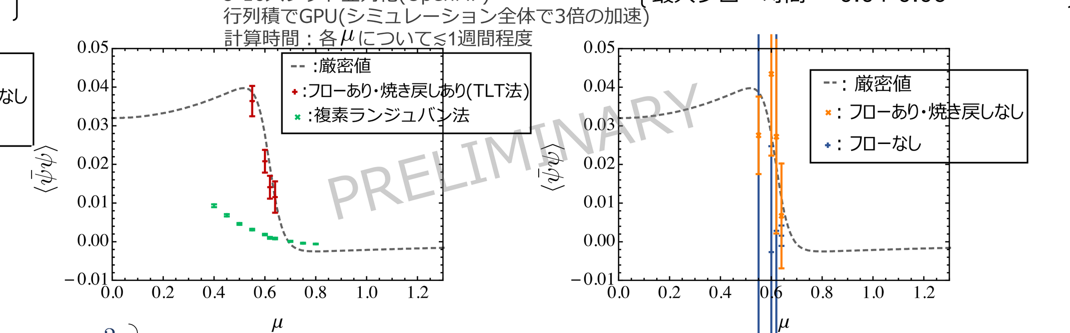
- カイラル凝縮の計算結果 [3] [$m=0.004$, $T=0$]

複素ランジュバン法(CL法): [Parisi(1983), Klauder(1983)]
CL法の本模型への適用については: [cf. Bloch et al.(2018)]

$N_m=6$ $N_{\rm conf}=1000\sim5000$
8-10スレッド並列化(OpenMP)
計算時間：各μについて≲2日程度
[#(Σ_t) = 2-28 ← チューニングせず
最大フロー時間 = 0.01-0.05]



$N_m=8$ $N_{\rm conf}=700-1100$
8-10スレッド並列化(OpenMP)
行列積でGPU(シミュレーション全体で3倍の加速)
計算時間：各μについて≲1週間程度
[#(Σ_t) = 24-40 ← チューニングせず
最大フロー時間 = 0.04-0.06]



- 計算コストについて [3] [自由度と行列サイズの関係 $N=2N_m^2$]
- TLT法の計算コスト=(各Σ_tでの計算に必要なコスト)x(Σ_tの数)
  $J_t(x)$ の計算のため $O(N^3)$ ／ ガウシアンを用いた予想 $=O(N^{0-1})\times O(\ln N)$
  間隔を狭める フロー時間を増やす

焼き戻しで十分な採択率(0.23~0.5)を得るために必要なΣ_tの数(preliminary)

N_m (N)	4 (32) (符号問題なし)	6 (72)	8 (128)	10 (200)
最大フロー時間	(0)	0.03	0.06	(0.11)
Σ_tの数	(1)	6	32	(147)

[$m=0.052, \mu=0.6, T=0$]

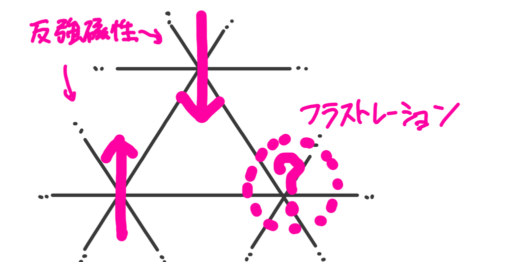
上記予想より数字が大きいように思われるが、その理由として現在、以下の可能性を考えている：
- Nが小さいことによる特異な振る舞い
  (特に、シンブル数の増大によって $e^{i\theta(z)}$がばらつくことによる影響)
- 臨界点周りにある異方性
- 小さいtにおけるフローの振る舞い

[D] フラストレート系への適用 [4]

- 三角格子上の反強磁性イジング模型

$$\beta H \equiv \frac{\beta}{2}\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\sigma_{\mathbf{x}}K_{\mathbf{xy}}\sigma_{\mathbf{y}} - h\sum_{\mathbf{x}}\sigma_{\mathbf{x}}$$

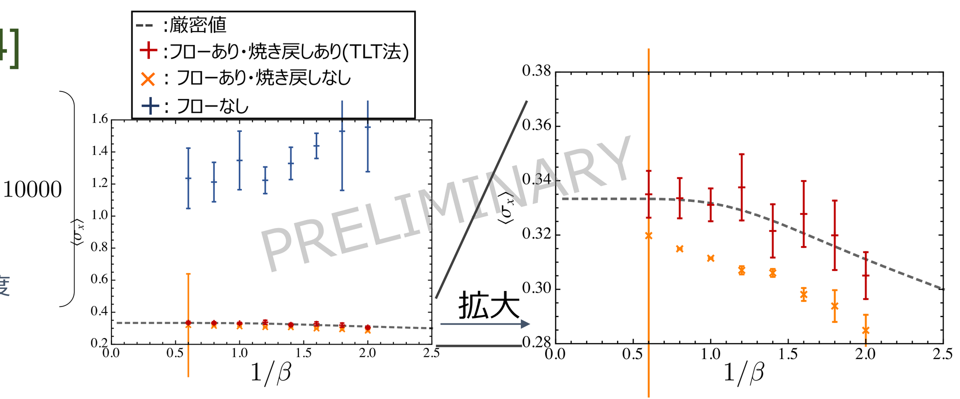
[$K_{\mathbf{xy}}$：三角格子の隣接行列（周期境界条件）]



⇒ ボソン変数を導入してTLT法を適用

- 磁化 [4]

(3x3格子
$h/\beta=3$
$N_{\rm conf}=1300\sim10000$
計算時間：
各$1/\beta$について
数時間~1日程度)



予想されている相図
e.g. [Kinzel-Schick (1981)]