

Tempered Lefschetz thimble法の 強相関電子系への適用

松本 信行 (京大理)

福間将文氏 (京大理)、
梅田直弥氏 (PwC) との共同研究に基づく
Fukuma, NM, Umeda 1906.04243

Short summary

- 「ハーフフィリングから外れた場合のHubbard模型」や「有限密度QCD」においてモンテカルロ(MC)計算を行うと符号問題が発生する

tempered Lefschetz thimble法 (TLT法) : 符号問題を解消するアルゴリズム
[Fukuma, Umeda (2017)]

- antiholomorphic gradient flow を用いた積分面の連続変形により被積分関数の振動を抑制
- この変形により生じるmultimodalityの問題を「flow 時間によるテンパリング」で解消

	flow なし	flow あり テンパリングなし (GLT法)	flow あり テンパリングあり (TLT法)
振動積分の抑制	×	△	○
マルチモダリティ	-	△	○

Main results

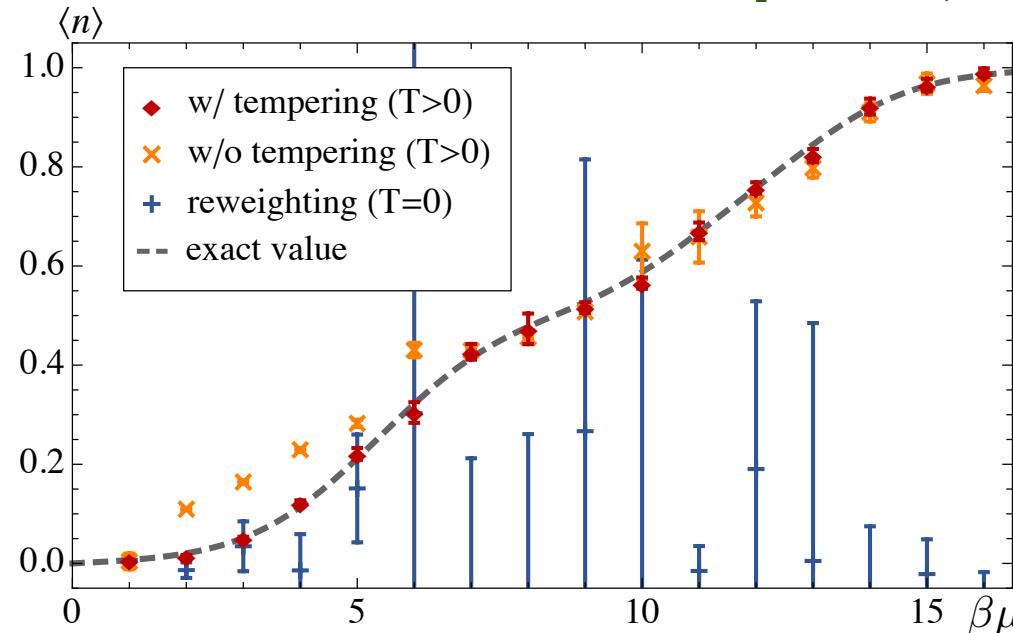
- TLT法では期待値の計算だけでなく、計算が正確に行われているかの評価も
〔・マルコフ連鎖が大域平衡に到達していること
・サンプルサイズが十分であること〕

同時に見えることを示す [Fukuma, NM, Umeda (2019)]

[key 積分面の連續変形で期待値は不变 (Cauchyの定理)]

- TLT法を2次元Hubbard模型に適用し、
少数サイト(2x2)に対してであるが、厳密値が正しく再現されることを示す

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]



Plan

1. 符号問題・Lefschetz thimble
2. Generalized Lefschetz thimble (GLT)法
3. Tempered Lefschetz thimble (TLT)法
4. Hubbard 模型への適用
5. まとめ・今後の展望

1. 符号問題・Lefschetz thimble

〔 Witten (2010), Cristoforetti, Di Renzo, Scorzato (2012)
Fujii, Honda, Kato, Kikukawa, Komatsu, Sano (2013) 〕

符号問題

目的：期待値の計算

$$\langle \mathcal{O} \rangle_S \equiv \frac{\int dx e^{-S(x)} \mathcal{O}(x)}{\int dx e^{-S(x)}}$$

- $x = (x^i) \in \mathbb{R}^N$: 力学変数
- $S(x)$: 作用
- $\mathcal{O}(x)$: 物理量

$S(x)$ が複素数のとき $p(x) = \frac{e^{-S(x)}}{\int dx e^{-S(x)}}$ を確率分布とみなせないため、
素朴にはMCの方法を適用できない

reweighting法

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O} \rangle_S &= \frac{\int dx e^{-S(x)} \mathcal{O}(x)}{\int dx e^{-S(x)}} \\ &= \frac{\int dx e^{-S_R(x)} \cdot e^{-iS_I(x)} \mathcal{O}(x)}{\int dx e^{-S_R(x)} \cdot e^{-iS_I(x)}} \quad \leftarrow \begin{cases} S(x) \equiv S_R(x) + iS_I(x), \\ \text{実部} \quad \text{虚部} \end{cases} \\ &= \frac{\langle e^{-iS_I(x)} \mathcal{O}(x) \rangle_{S_R}}{\langle e^{-iS_I(x)} \rangle_{S_R}} \quad \leftarrow \begin{cases} p_R(x) \equiv \frac{e^{-S_R(x)}}{\int dx e^{-S_R(x)}} \\ \text{を確率分布とみなしてMCで計算} \end{cases}\end{aligned}$$

特に作用の値が大きくなる時(e.g. 熱力学極限、低温極限)、
被積分関数の振動が激しくなり分母・分子が小さな値になる

→ 誤差を小さくするために
大きな計算コストが必要

このように、 $e^{-S(x)}$ が正值でないこと(特にここでは複素数値であること)
によって生じる数値的評価の困難を符号問題と呼ぶ

例 : Gaussian

$$\left[\begin{array}{l} \bullet S(x) \equiv \frac{\beta}{2}(x - i)^2 = \frac{\beta}{2}\{x^2 - 1\} + i\{-\beta x\} \\ \bullet \mathcal{O}(x) \equiv x^2 \end{array} \right] \quad \left[\begin{array}{l} \text{分母・分子をそれぞれMCで評価} \\ N_{\text{conf}} > e^\beta \text{ の計算コストが必要} \end{array} \right]$$

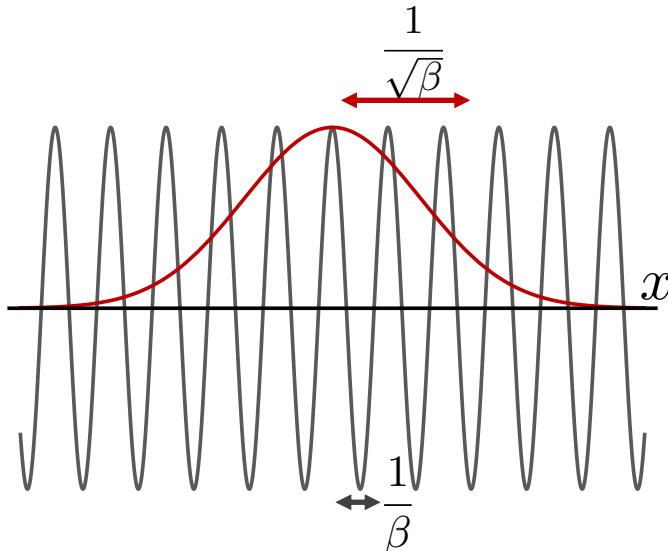
期待値の評価 (reweighting法)

$$\langle \mathcal{O} \rangle_S = \frac{\langle e^{-iS_I(x)} \mathcal{O}(x) \rangle_{S_R}}{\langle e^{-iS_I(x)} \rangle_{S_R}} = \frac{(\frac{1}{\beta} - 1)e^{-\frac{\beta}{2}}}{e^{-\frac{\beta}{2}}} \approx \frac{(\frac{1}{\beta} - 1)e^{-\frac{\beta}{2}} \pm O(\frac{1}{\sqrt{N_{\text{conf}}}})}{e^{-\frac{\beta}{2}} \pm O(\frac{1}{\sqrt{N_{\text{conf}}}})}$$

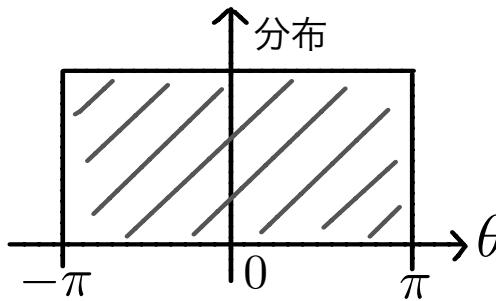
直感的理解

$\beta \gg 1$ のとき、Gaussianの幅の中で位相因子 $e^{-iS_I(x)} \equiv e^{i\theta(x)}$ は激しく値を変える

→ 積分時に大きな cancellationが発生



このとき、位相 θ の分布はほとんど一様分布になる：



Lefschetz thimbleを用いた符号問題へのアプローチ

〔 Witten (2010), Cristoforetti, Di Renzo, Scorzato (2012)
Fujii, Honda, Kato, Kikukawa, Komatsu, Sano (2013) 〕

問題点：評価したい積分が(元の \mathbb{R}^N 上で)激しい振動積分であること

解決法：積分面を \mathbb{C}^N 内で変形し、
被積分関数ができるだけ振動しないように積分面を設定しなおす：

- 力学変数を複素化 : $x = (x^i) \in \mathbb{R}^N \rightarrow z = (z^i) \in \mathbb{C}^N$

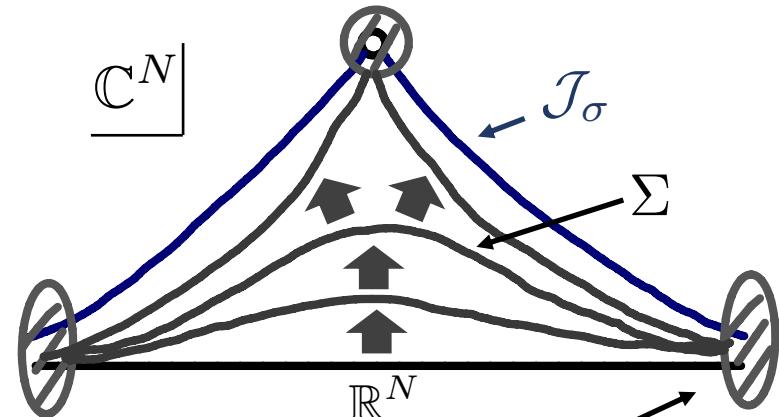
〔 この複素化の下で、 $e^{-S(z)}$, $e^{-S(z)}\mathcal{O}(z)$ は \mathbb{C}^N 上の整関数であるとする 〕

- 積分面を連続変形 : $\mathbb{R}^N \rightarrow \Sigma \subset \mathbb{C}^N$

〔 ただし積分面の境界は、積分が収束するように
 $\text{Re}S(z) \rightarrow \infty$ となる領域に固定 〕

このときCauchyの定理より

$$\int_{\mathbb{R}^N} dx e^{-S(x)} \mathcal{O}(x) = \int_{\Sigma} dz e^{-S(z)} \mathcal{O}(z)$$



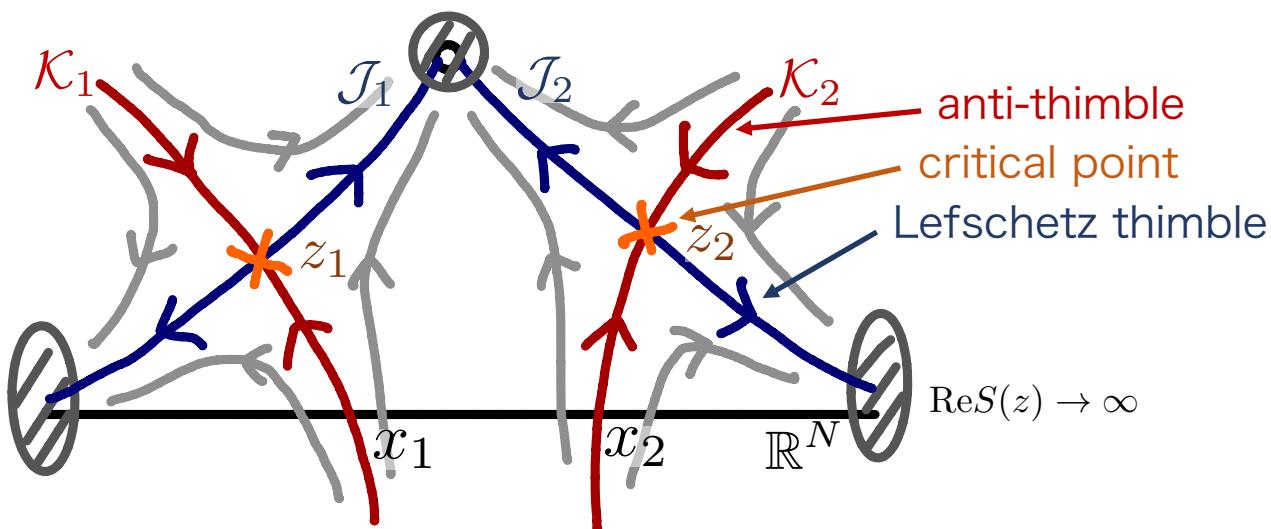
- 理想的な積分面：“Lefschetz thimble” \mathcal{J}_σ (のホモロジー的線形和)

〔 性質 $\text{Im}S(z) = \text{const.}$ on each \mathcal{J}_σ 〕

〔 1自由度 $N = 1$ の場合、steepest descent pathに対応 〕

$\text{Re}S(z) \rightarrow \infty$
となる領域

\mathbb{C}^N 上のflowを用いて Lefschetz thimble \mathcal{J}_σ と anti-thimble \mathcal{K}_σ を定義する：



antiholomorphic gradient flow

- t : flow time
 - flow eq. : $\dot{z}_t = [\partial S(z_t)]^*$
 - 性質 : $[S(z_t)]^\bullet = |\partial S(z_t)|^2 \geq 0$
- 等号成立は critical points z_σ 上のみ
 $(\partial S(z_\sigma) = 0)$

$z \neq z_\sigma$ では
 $[\text{Re } S(z_t)]^\bullet > 0, [\text{Im } S(z_t)]^\bullet = 0$

note [z_σ 近傍のflow]

- $S(z)$ の Taylor 展開 :

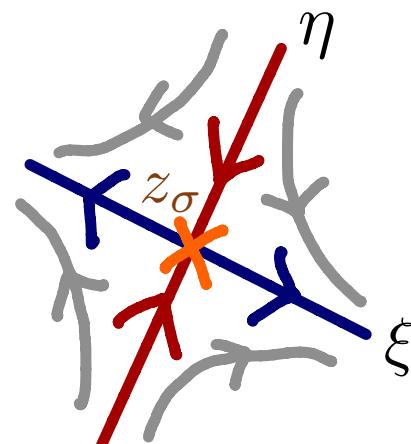
$$S(z) \simeq S(z_\sigma) + \frac{1}{2} (\partial_i \partial_j S)(z_\sigma) (z - z_\sigma)^i (z - z_\sigma)^j$$

||| 特異値分解

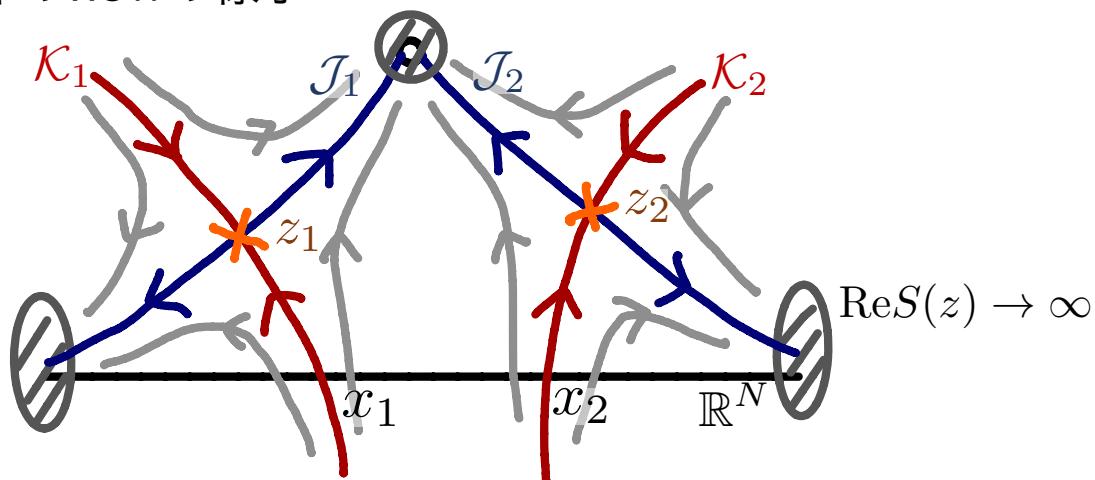
$$\sum_{k=1} \lambda_k U_{ki} U_{kj} \quad [\lambda_k \geq 0, (U_{ij}) \in U(N)]$$

$$\begin{aligned} & U_{ij} (z - z_\sigma)^j \equiv \xi^i + i\eta^i \\ & = S(z_\sigma) + \frac{1}{2} \sum_k \lambda_k [(\xi^k)^2 - (\eta^k)^2 + 2i\xi^k \eta^k] \end{aligned}$$

ξ : $\text{Re}S(z)$ が増大する方向
 η : $\text{Re}S(z)$ が減少する方向
↓
 flow は ξ を増大、 η を減少させるように進む



- 全体のflowの様子



defs Lefschetz thimble : $\mathcal{J}_\sigma \equiv \{z \in \mathbb{C}^N \mid \lim_{t \rightarrow -\infty} z_t(z) = z_\sigma\}$

[critical point から流れ出す点の集合]

anti-thimble : $\mathcal{K}_\sigma \equiv \{z \in \mathbb{C}^N \mid \lim_{t \rightarrow +\infty} z_t(z) = z_\sigma\}$

[critical point へ流れ込む点の集合]

note

- \mathcal{J}_σ または \mathcal{K}_σ 上の点 z に対して $\text{Im}S(z) = \text{Im}S(z_\sigma) = \text{const.}$
 $(\because \text{flow に沿って } [\text{Im}S(z_t)]^\bullet = 0)$

2. Generalized Lefschetz thimble (GLT) 法

[Alexandru, Başar, Bedaque (2016)]

Generalized Lefschetz thimble 法 (1/2)

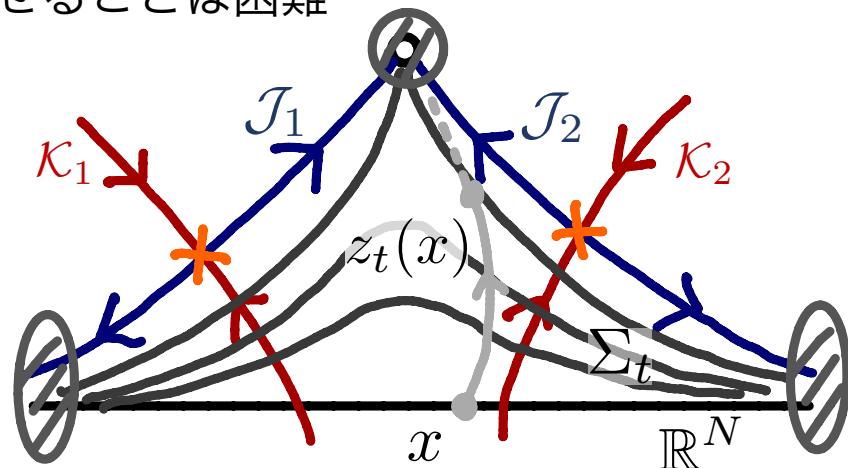
[Alexandru, Başar, Bedaque (2016)]

問題点：適切な Lefschetz thimble の線形和を見つけ出し、
それらの寄与を正しい重みで足し合わせることは困難

解決法 (GLT法)：

antiholomorphic gradient flow を用いた
 \mathbb{R}^N からの連続変形により積分面をつくる：

$$\mathbb{R}^N \longrightarrow \Sigma_t \equiv z_t(\mathbb{R}^N)$$



notes

- Σ_t は $t \rightarrow \infty$ で Lefschetz thimble へ近づく
∴ t を大きくとるほど、被積分関数の振動を抑えることができる
- flow の始点 $x \in \mathbb{R}^N$ は Σ_t 上の座標となっている
 $\therefore \int_{\mathbb{R}^N} dx e^{-S(x)} \mathcal{O}(x) = \int_{\Sigma_t} dz e^{-S(z)} \mathcal{O}(z)$ $= \int_{\mathbb{R}^N} dx \det \left(\frac{\partial z_t}{\partial x} \right) e^{-S(z_t(x))} \mathcal{O}(z_t(x))$
 $\therefore (\Sigma_t \text{が複数の曲面に分離した場合にも})$
相対的な重みを正しく取り入れたサンプリングが \mathbb{R}^N 上で可能

Generalized Lefschetz thimble 法 (2/2)

[Alexandru, Başar, Bedaque (2016)]

期待値の評価 (GLT法)

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{O} \rangle_S &= \frac{\int_{\mathbb{R}^N} dx \det J_t e^{-S(z_t(x))} \mathcal{O}(z_t(x))}{\int_{\mathbb{R}^N} dx \det J_t e^{-S(z_t(x))}} \\
 &= \frac{\int_{\mathbb{R}^N} dx |\det J_t| e^{-\text{Re}S(z_t(x))} \cdot e^{i[-\text{Im}S(z_t(x)) + \arg \det J_t]} \mathcal{O}(z_t(x))}{\int_{\mathbb{R}^N} dx |\det J_t| e^{-\text{Re}S(z_t(x))} \cdot [e^{i[-\text{Im}S(z_t(x)) + \arg \det J_t]}]} \\
 &\quad \stackrel{\parallel}{=} e^{-S_t^{\text{eff}}(x)} \stackrel{\parallel}{=} e^{i\theta_t(x)} \\
 &= \frac{\int_{\mathbb{R}^N} dx e^{-S_t^{\text{eff}}(x)} \cdot e^{i\theta_t(x)} \mathcal{O}(z_t(x))}{\int_{\mathbb{R}^N} dx e^{-S_t^{\text{eff}}(x)} \cdot e^{i\theta_t(x)}} \\
 &= \frac{\langle e^{i\theta_t} \mathcal{O}(z_t) \rangle_{S_t^{\text{eff}}}}{\langle e^{i\theta_t} \rangle_{S_t^{\text{eff}}}}
 \end{aligned}$$

$$\left\{
 \begin{array}{l}
 z_t(x), J_t(x) \text{ は次の連立微分方程式を積分して得る : } \\
 \left[\begin{array}{l} \dot{z}_t(x) = [\partial S(z_t(x))]^* \\ \dot{J}_t(x) = [H(z_t(x)) \cdot J_t(x)]^* \end{array} \right] \quad \left[\begin{array}{l} z_{t=0}(x) = x \\ J_{t=0}(x) = \mathbb{1} \end{array} \right]
 \end{array} \right.$$

例 : Gaussian

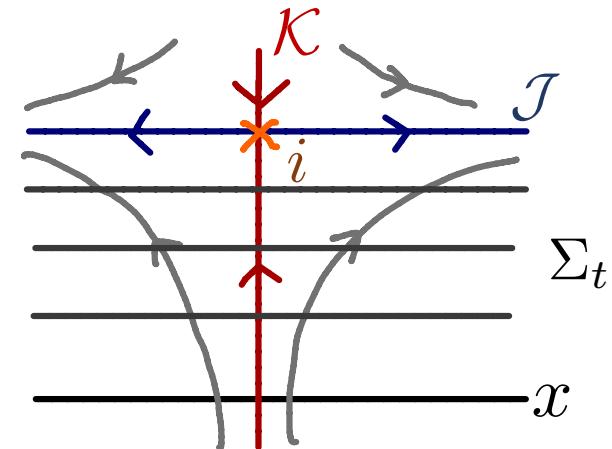
$$\begin{cases} \bullet S(x) = \frac{\beta}{2}(x - i)^2 \longrightarrow S_t^{\text{eff}}(x) = \frac{\beta e^{2\beta t}}{2} (x^2 - e^{-4\beta t}) - \beta t \\ \bullet \mathcal{O}(x) = x^2 \end{cases}$$

期待値の評価 (GLT法)

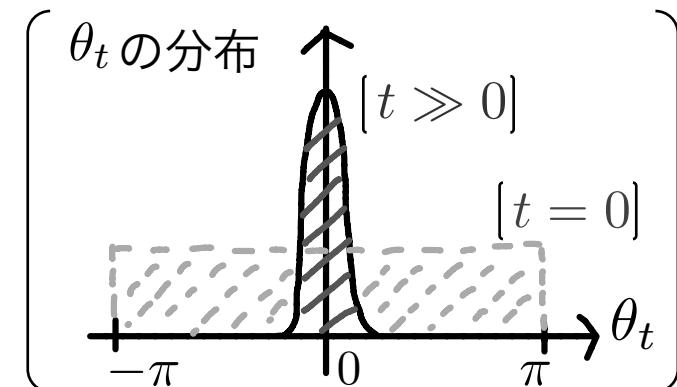
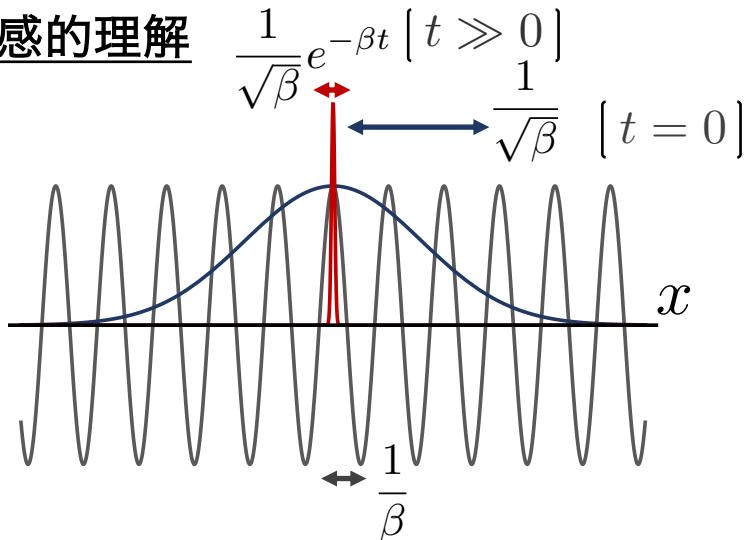
$$\langle \mathcal{O} \rangle_S = \frac{\langle \mathcal{O}(z_t) e^{i\theta_t} \rangle_{S_t^{\text{eff}}} }{\langle e^{i\theta_t} \rangle_{S_t^{\text{eff}}}} = \frac{\left(\frac{1}{\beta} - 1\right) e^{-\frac{\beta}{2} e^{-2\beta t}}}{e^{-\frac{\beta}{2} e^{-2\beta t}}}$$

note

$\langle e^{i\theta_t} \rangle_{S_t^{\text{eff}}} \stackrel[t \rightarrow \infty]{\longrightarrow} 1$ $\therefore t$ を十分に大きくとれば
分母・分子を $O(1)$ にできる

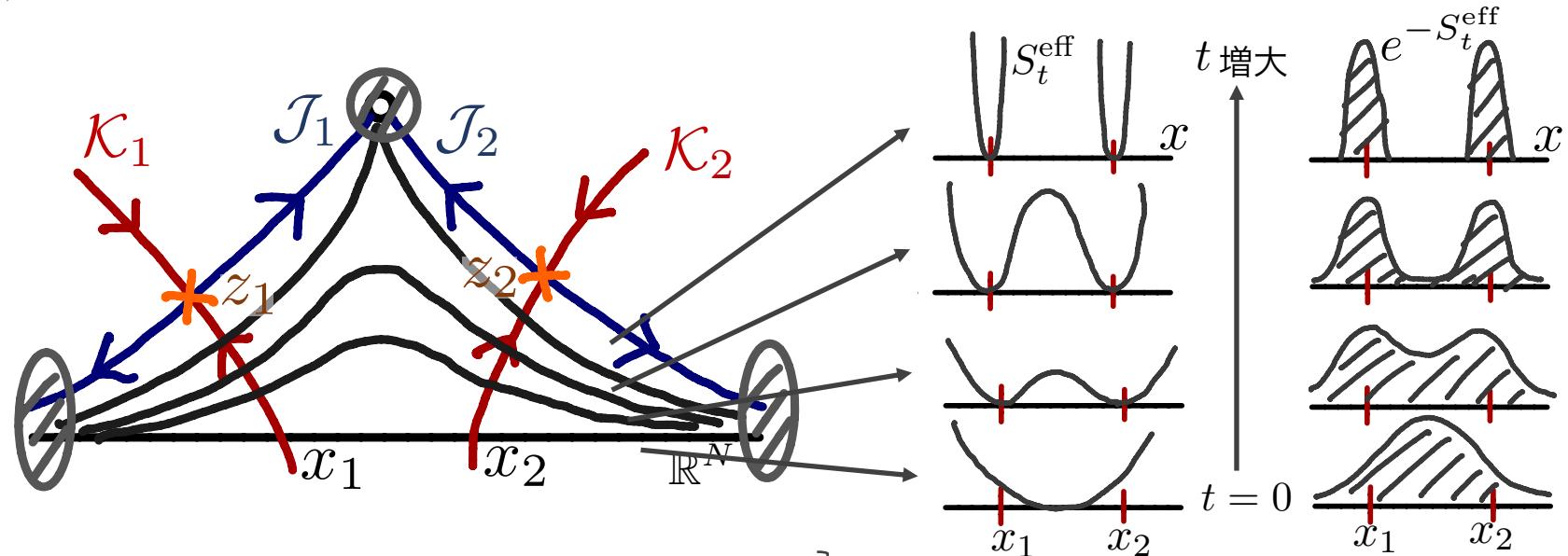


直感的理解



multimodality

- t を大きくすると \mathcal{K}_σ と \mathbb{R}^N の交点 ($\equiv x_\sigma$) 周りを除き、
 $S_t^{\text{eff}}(x)$ の値は急速に増大する (実際、fermion determinant がある場合は finite t で ∞)
 → 複数の thimble が寄与する場合、平衡分布は multimodal になる



- multimodalな分布に対してMC計算を行うと、あるピークのまわりに配位がトラップされ目的の平衡分布 $\propto e^{-S_t^{\text{eff}}}$ とは異なる分布から配位を生成することになる

∴ multimodality の問題を避けるためには、 t を小さくとる必要がある

→ flow 時間を1つに固定すると
 振動積分の抑制と multimodality の問題でジレンマが生じる

3. Tempered Lefschetz thimble (TLT)法

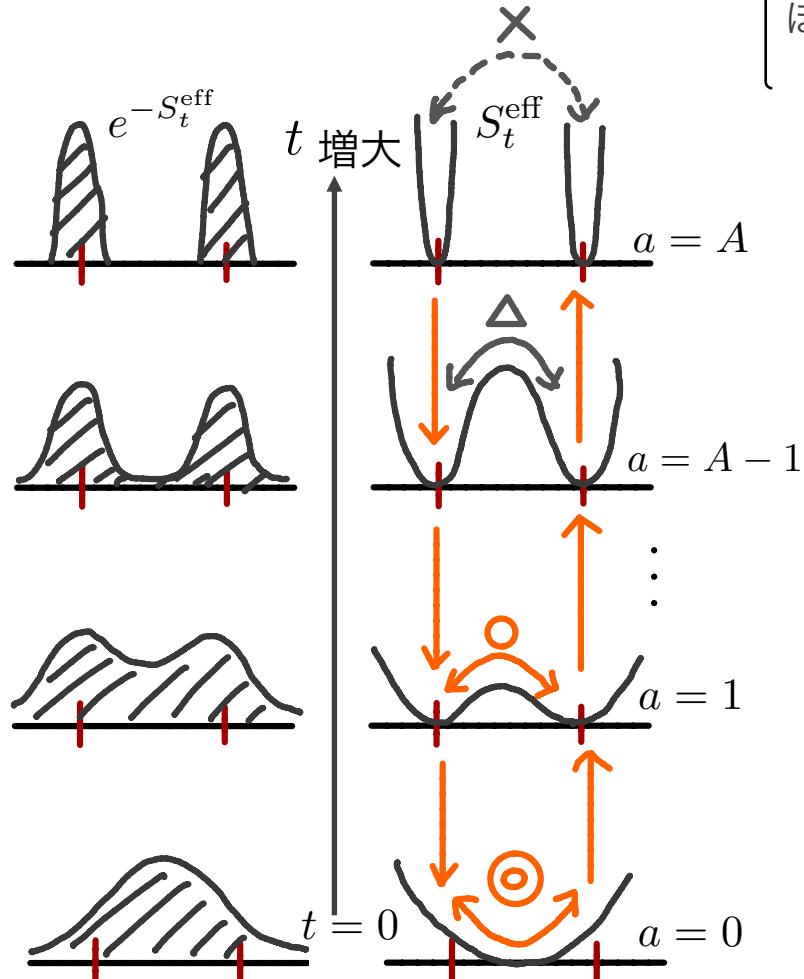
[Fukuma, Umeda (2017), Fukuma, NM, Umeda (2019)]

フロー時間によるテンパリング

[Fukuma, Umeda (2017)]

ジレンマ：振動積分の抑制とmultimodality問題

解決法(TLT法)： t をテンパリングパラメーターとしてテンパリング法を適用する
i.e. t を小さく設定した配位空間を遷移の迂回路として用意する



パラメーターのfine tuning が
ほとんど必要ないparallel tempering を用いる
[Swendensen, Wang (1986), Geyer (1991)]

概略 (詳細は次頁)

- x 空間のコピー(レプリカ)を用意：
 $\{x\} \rightarrow \{(x_0, x_1, \dots, x_A)\}$
- 各レプリカ a に対して
flow 時間 t_a を設定
 $(t_0 \equiv 0 < t_1 < \dots < t_A \equiv T)$
- x 方向の遷移だけでなく、
レプリカ間で配位の交換も行うことで、
拡大された配位空間 $\{(x_0, \dots, x_A)\}$ 上で
大域的な平衡分布を実現させる：

$$P_{\text{eq}}(x_0, \dots, x_A) \propto \prod_{a=0}^A e^{-S_{t_a}^{\text{eff}}(x_a)}$$

具体的アルゴリズム (1/2)

① 積分の振動が十分抑制されるように、最大 flow 時間 T を十分大きく設定

② (前述のように)

$\{t_a\}_{a=0, \dots, A}$ を選び配位空間を拡大：

$$\{x\} \rightarrow \{(x_0, x_1, \dots, x_A)\}$$

$$[t_0 \equiv 0 < t_1 < \dots < t_A \equiv T]$$

各 a に対して、独立な初期値 $x_a \in \mathbb{R}^N$ から
flow eq. を積分する：
 $(x_a, z_a \equiv z_{t_a}(x_a), J_a \equiv J_{t_a}(x_a))$

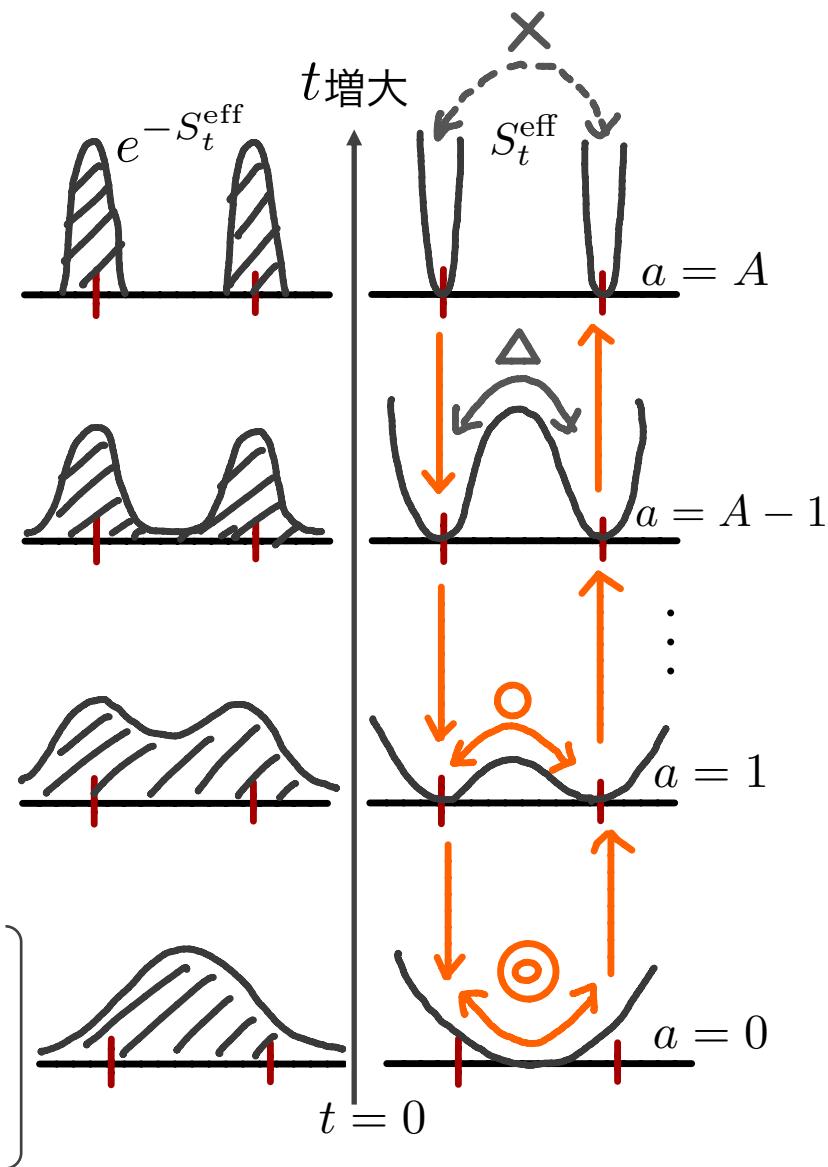
④ 各レプリカ a 上で独立に x 方向の遷移を行い、局所平衡を実現

⑤ Metropolis法により
隣り合うレプリカ間で配位 (x_a, x_{a+1}) を交換：

$$(x_a, x_{a+1}) = (x, y) \rightarrow (x'_a, x'_{a+1}) = (y, x) \text{ と提案}$$

これを確率 $\min \left(1, \frac{e^{-S_t^{eff}(y)} - S_t^{eff}(x)}{e^{-S_t^{eff}(x)} - S_t^{eff}(y)} \right)$ で採択

[Fukuma, Umeda (2017)]



具体的アルゴリズム (2/2)

[Fukuma, Umeda (2017)]

⑥ x 方向の遷移とレプリカ間の交換を繰り返し、 N_{conf} 個の配位を得る：

$$\{(x_a^{(k)}, z_a^{(k)}, J_a^{(k)})\}_{k=1, \dots, N_{\text{conf}}}$$

flow 時間 t_a の下での期待値の評価：

$$\langle \mathcal{O} \rangle_S = \frac{\langle e^{i\theta_{t_a}} \mathcal{O}(z_{t_a}) \rangle_{S_{t_a}^{\text{eff}}}}{\langle e^{i\theta_{t_a}} \rangle_{S_{t_a}^{\text{eff}}}} \approx \frac{\sum_{k=1}^{N_{\text{conf}}} e^{i\theta_{t_a}(x^{(k)})} \mathcal{O}(z_a^{(k)})}{\sum_{k=1}^{N_{\text{conf}}} e^{i\theta_{t_a}(x^{(k)})}} \equiv \overline{\mathcal{O}}_a \quad \begin{array}{l} \leftarrow \text{推定値に} \\ \text{バーの記号を使用} \end{array}$$

note [Fukuma, NM, Umeda (2019)]

$\overline{\mathcal{O}}_a$ は a によらず同じ $\langle \mathcal{O} \rangle_S$ の推定値を与える

∴ システムが大域平衡に到達しており、サンプルサイズ N_{conf} が十分であれば、
任意の a に対し、(誤差の範囲で) $\overline{\mathcal{O}}_a$ は同じ値を取る

practical comments

- 確率分布のピークの位置は x_σ に固定されている
→ 分布間のオーバーラップは十分に確保される
- アルゴリズムの大部分は並列計算ができる
→ レプリカ数の増加に伴う計算量の増加は並列化により対処できる

TLT法における正確な推定 (1/2)

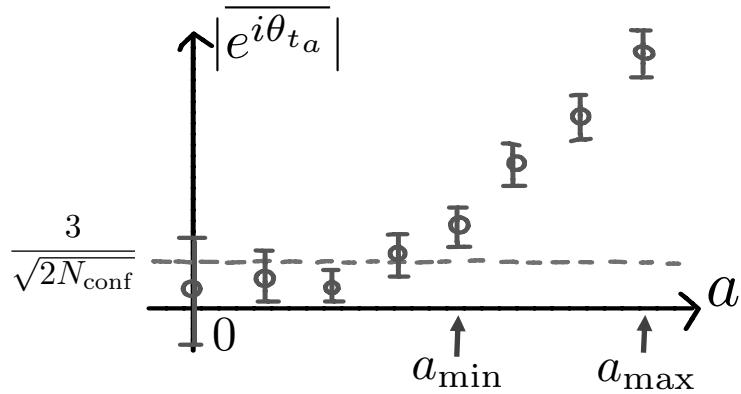
[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

- TLT法では、次のようにして正確に期待値を評価できる：

① $\left| \langle e^{i\theta_{t_a}} \rangle_{S_{t_a}^{\text{eff}}} \right|$ が十分に大きくなっている a の範囲を特定する
 $\longrightarrow a = a_{\min}, \dots, a_{\max} \equiv A$

$$\left[\langle \mathcal{O} \rangle_S = \frac{\langle e^{i\theta_{t_a}} \mathcal{O}(z_{t_a}) \rangle_{S_{t_a}^{\text{eff}}}}{\langle e^{i\theta_{t_a}} \rangle_{S_{t_a}^{\text{eff}}}} \right]$$

採用した基準：誤差を含めて $|\overline{e^{i\theta_{t_a}}}|$ が $\frac{3}{\sqrt{2N_{\text{conf}}}}$ よりも大きいこと



θ_{t_a} が一様分布とすると、 $\overline{e^{i\theta_{t_a}}} \equiv \frac{1}{N_{\text{conf}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{conf}}} e^{i\theta_{t_a}(x^{(k)})}$ について
 $\langle \overline{e^{i\theta_{t_a}}} \rangle = 0, \delta \left| \langle \overline{e^{i\theta_{t_a}}} \rangle \right| = \frac{1}{\sqrt{2N_{\text{conf}}}}.$

∴ 逆に、 $|\overline{e^{i\theta_{t_a}}}|$ が $\frac{1}{\sqrt{2N_{\text{conf}}}}$ より十分に大きければ、

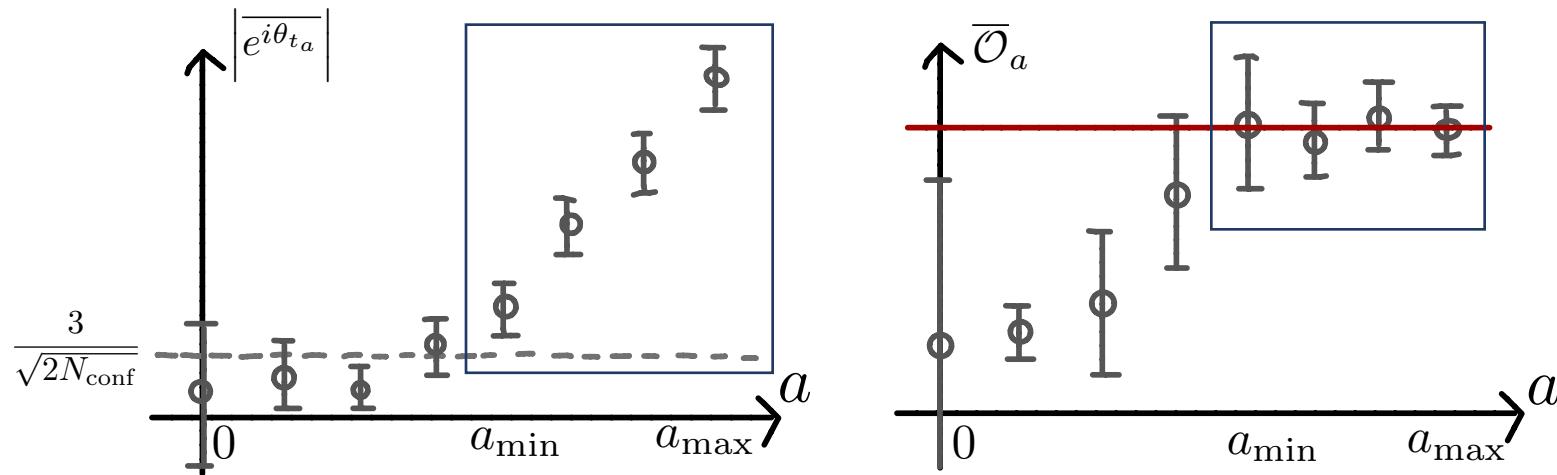
θ_{t_a} の分布は一様分布から十分に外れている

(i.e. 積分の振動は十分に抑制されている) と判断できる

TLT法における正確な推定 (2/2)

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

② $\{\overline{\mathcal{O}}_a\}_{a=a_{\min}, \dots, a_{\max}}$ に対して、定数関数による χ^2 フィットを行う



正しく期待値の評価を行えているかは、得られた χ^2 の値により判断できる

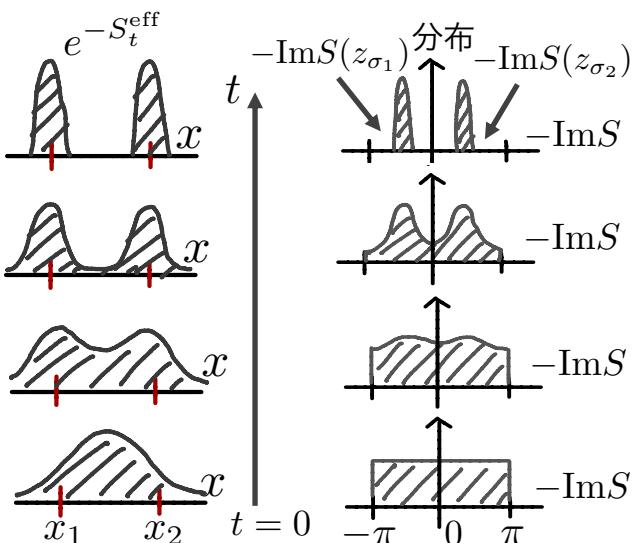
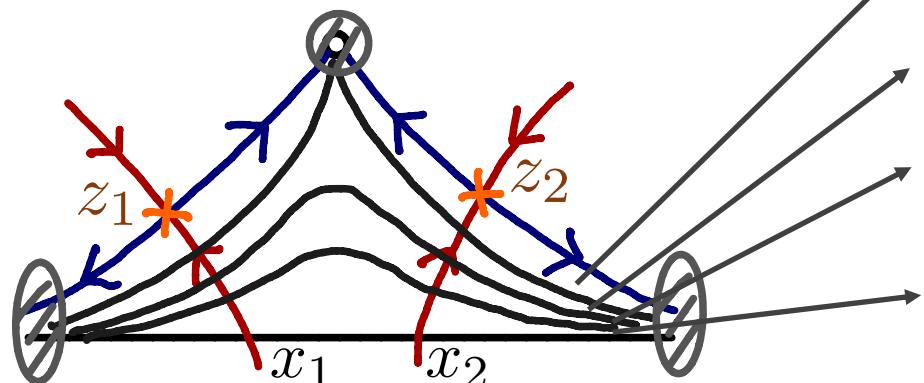
comment : global sign mixture / residual sign

- 一般に、 $t \rightarrow \infty$ で $|\langle e^{i\theta_t} \rangle_{S_t^{\text{eff}}}| \rightarrow 1$ とならない

$$\left. \begin{array}{l} \theta_t(x) = -\text{Im}S(z_t(x)) + \arg \det J_t(x) \\ \textcircled{1} \\ \textcircled{2} \end{array} \right)$$

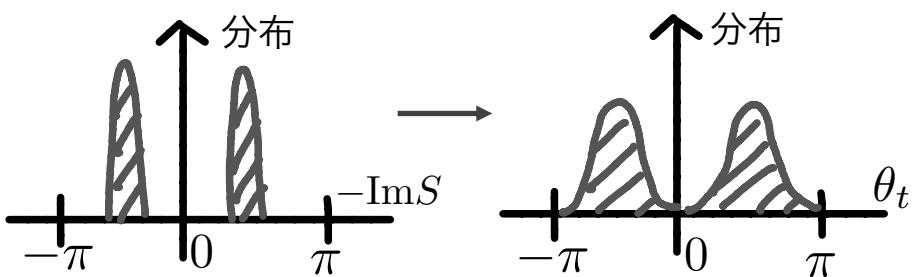
[∴] ① (global sign mixture)

複数のthimbleが寄与する場合、
 z_σ ごとに $\text{Im}S(z_\sigma)$ の値は異なっていてよい



② (residual sign)

θ_t にはヤコビアンからの寄与がある



note

- ①, ② は積分変数の取り方に依存する
 → 積分変数の取り方を変えることで状況はかなり変わる(確認済)

4. Hubbard 模型への適用

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

Hubbard 模型

- 固体中の電子の模型

[Hubbard (1963)]

defs

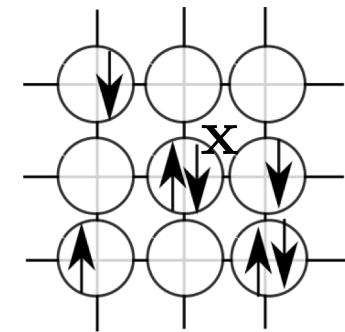
- $c_{\mathbf{x},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{x},\sigma}$: サイト \mathbf{x} 上のスピン σ をもつ電子の生成消滅演算子
- ハミルトニアン (化学ポテンシャルを含む) $\left(n_{\mathbf{x},\sigma} \equiv c_{\mathbf{x},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{x},\sigma} \right)$

$$H \equiv -\kappa \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} \sum_{\sigma} c_{\mathbf{x},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{y},\sigma} - \mu \sum_{\mathbf{x}} (n_{\mathbf{x},\uparrow} + n_{\mathbf{x},\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x},\uparrow} n_{\mathbf{x},\downarrow}$$

ホッピング項 $(\kappa > 0)$

化学ポテンシャル項

同一サイト上の電子間に働く
Coulomb 斥力を模した項 $(U > 0)$



note

以下では、 $n_{\mathbf{x},\sigma} \rightarrow n_{\mathbf{x},\sigma} - \frac{1}{2}$ とシフトして、

$\mu = 0$ がハーフフィーリングに対応するようにする： $\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left\langle n_{\mathbf{x},\sigma} - \frac{1}{2} \right\rangle \Big|_{\mu=0} = 0$

- ハミルトニアン (シフト後)

$$H \equiv -\kappa \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} \sum_{\sigma} c_{\mathbf{x},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{y},\sigma} - \mu \sum_{\mathbf{x}} (n_{\mathbf{x},\uparrow} + n_{\mathbf{x},\downarrow} - 1) + U \sum_{\mathbf{x}} \left(n_{\mathbf{x},\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{\mathbf{x},\downarrow} - \frac{1}{2} \right)$$

経路積分表示

ボソン変数を導入し、経路積分の形に書き換える：

$$Z \equiv \text{Tr } e^{-\beta H}$$

$$\simeq (\text{const.}) \int (\prod d\phi_{l,\mathbf{x}}) e^{-\frac{1}{2} \sum \phi_{l,\mathbf{x}}^2} \det M_a(\phi) \det M_b(\phi)$$

\uparrow
 虚時間方向を離散化
 $\beta \equiv N_\tau \epsilon$

$$\left[M_{a/b} = \mathbb{1} + e^{\pm \beta \mu} \cdot \text{T} \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\epsilon \kappa K} \cdot \text{diag } e^{\pm i \sqrt{\epsilon U} \phi_l} \right]$$

→ MCで用いる作用：

$$S(\phi) \equiv \frac{1}{2} \sum_{l,\mathbf{x}} \phi_{l,\mathbf{x}}^2 - \ln \det M_a(\phi) - \ln \det M_b(\phi)$$

note $S(\phi)$ は $\mu = 0$ で実数値 $\left(\because M_b(\phi)|_{\mu=0} = M_a(\phi)|_{\mu=0}^* \right)$

→ ハーフフィリングでは符号問題は発生しない

数密度演算子 $n \equiv \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{x},\sigma} \left(n_{\mathbf{x},\sigma} - \frac{1}{2} \right)$

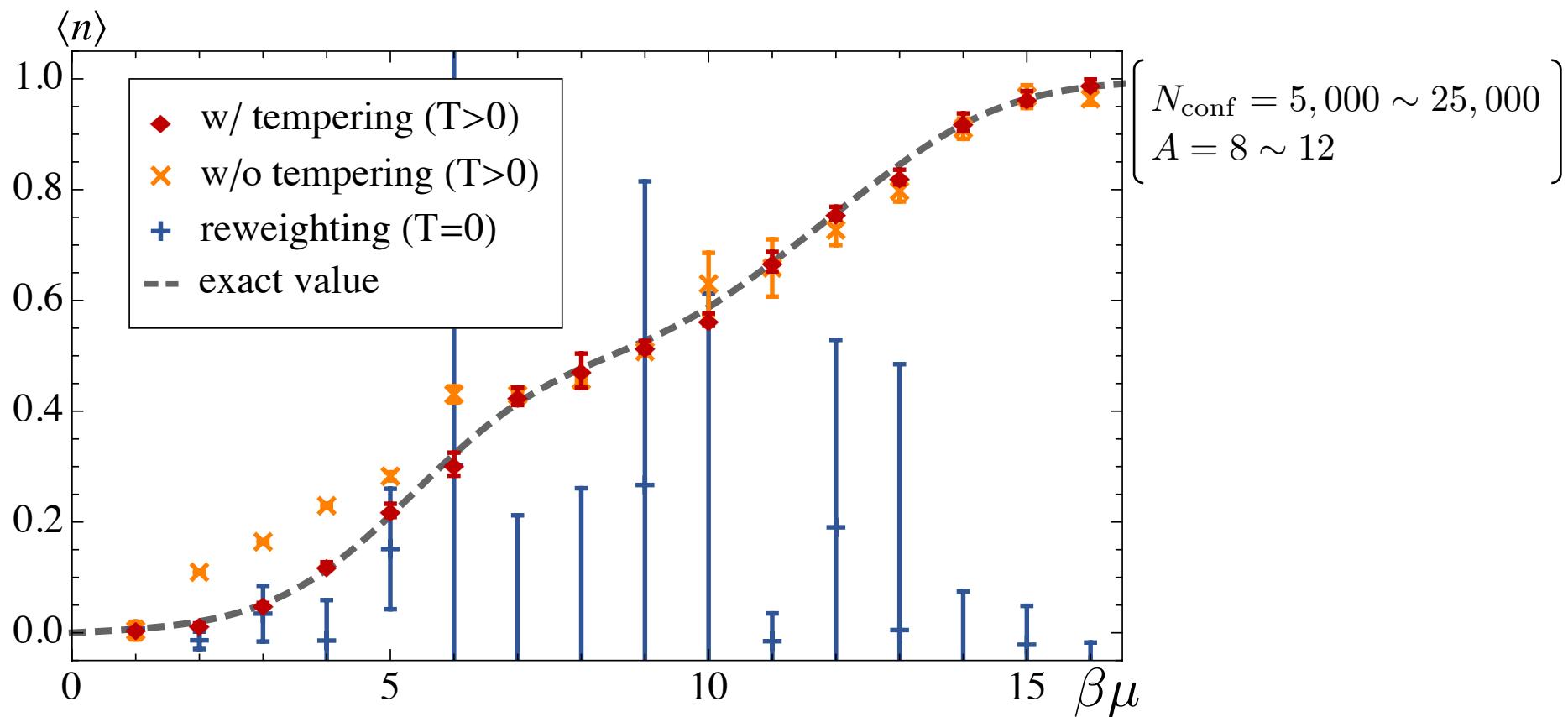
経路積分の形に書き換え: $\langle n \rangle \simeq \frac{\int [d\phi] e^{-S(\phi)} n(\phi)}{\int [d\phi] e^{-S(\phi)}} \equiv \langle n \rangle_S \quad \left(n(\phi) \equiv \frac{1}{i\sqrt{\epsilon U} N_\tau N_s} \sum_{l,\mathbf{x}} \phi_{l,\mathbf{x}} \right)$

$\langle n \rangle_S$ を TLT 法により評価する $\left[\begin{array}{l} x = (x^i) \equiv (\phi_{l,\mathbf{x}}) \in \mathbb{R}^N \\ i = (l, \mathbf{x}) = 1, \dots, N \quad (N \equiv N_\tau N_s) \end{array} \right]$

結果

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

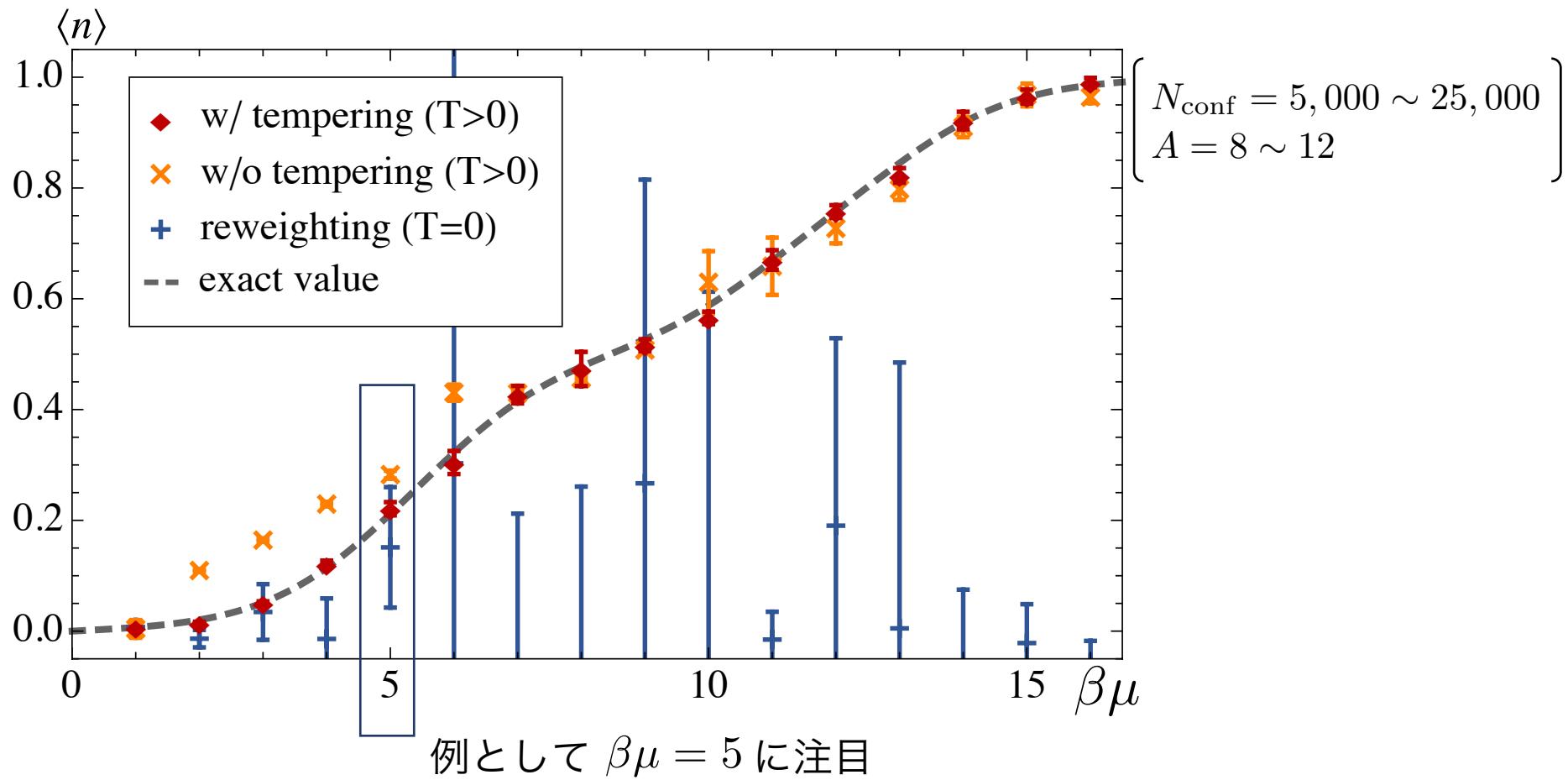
- 2×2 周期的正方格子 [$N_s = 4$], $N_\tau = 5$, $\beta\kappa = 3$, $\beta U = 13$
 $\beta\mu = 1, \dots, 16$ における数密度演算子 $n = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{x},\sigma} (n_{\mathbf{x},\sigma} - \frac{1}{2})$ の期待値を評価



結果

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

- 2×2 周期的正方格子 [$N_s = 4$], $N_\tau = 5$, $\beta\kappa = 3$, $\beta U = 13$
 $\beta\mu = 1, \dots, 16$ における数密度演算子 $n = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{x},\sigma} (n_{\mathbf{x},\sigma} - \frac{1}{2})$ の期待値を評価



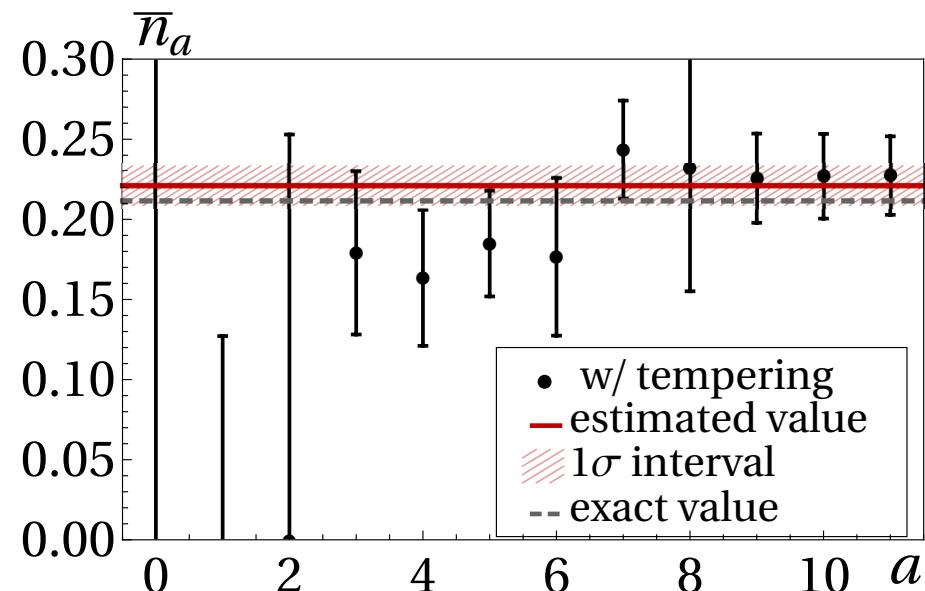
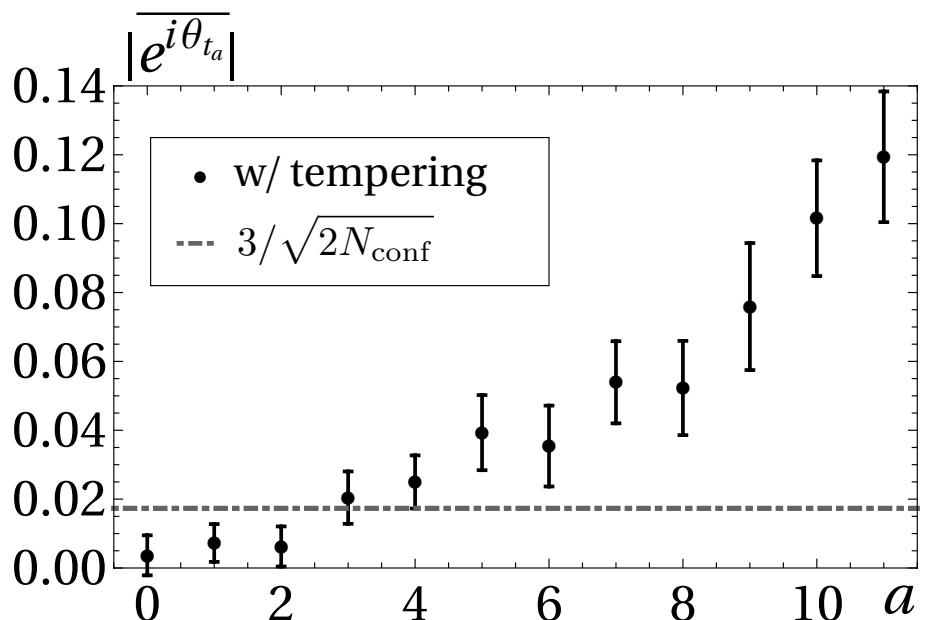
TLT法における正確な推定

$$\left[\beta\mu = 5, T = 0.5, N_{\text{conf}} = 15,000, A = 11 \right]$$

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

① $\left| \langle e^{i\theta_{t_a}} \rangle_{S_{t_a}^{\text{eff}}} \right|$ が十分に大きくなっている
 a の範囲を特定する

② $\{\overline{O}_a\}_{a=a_{\min}, \dots, a_{\max}}$ に対して、
定数関数による χ^2 フィットを行う



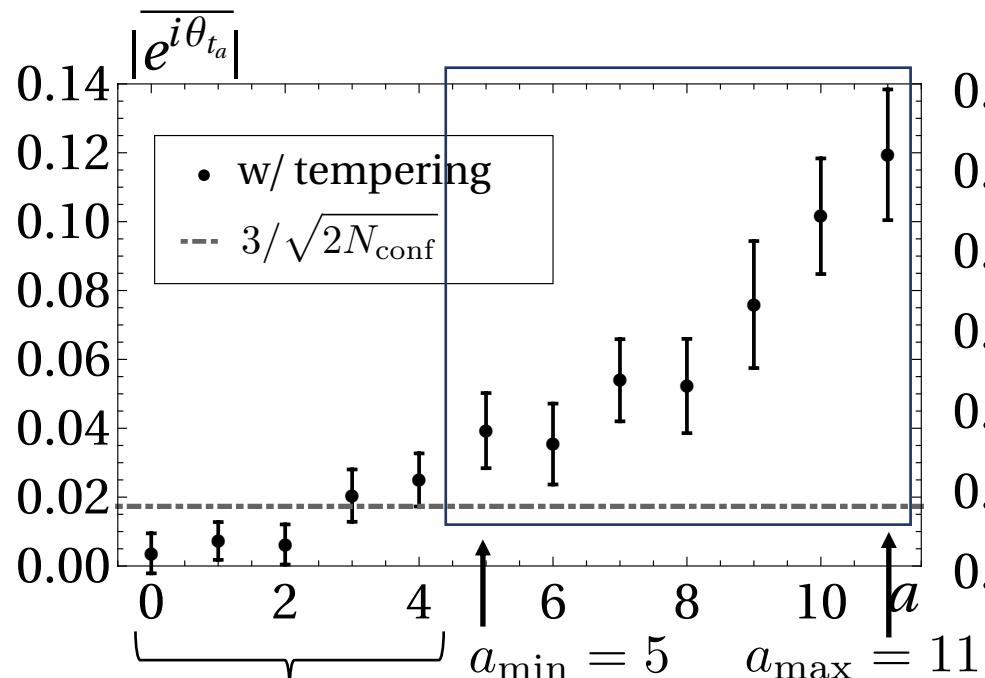
TLT法における正確な推定

$$\left[\beta\mu = 5, T = 0.5, N_{\text{conf}} = 15,000, A = 11 \right]$$

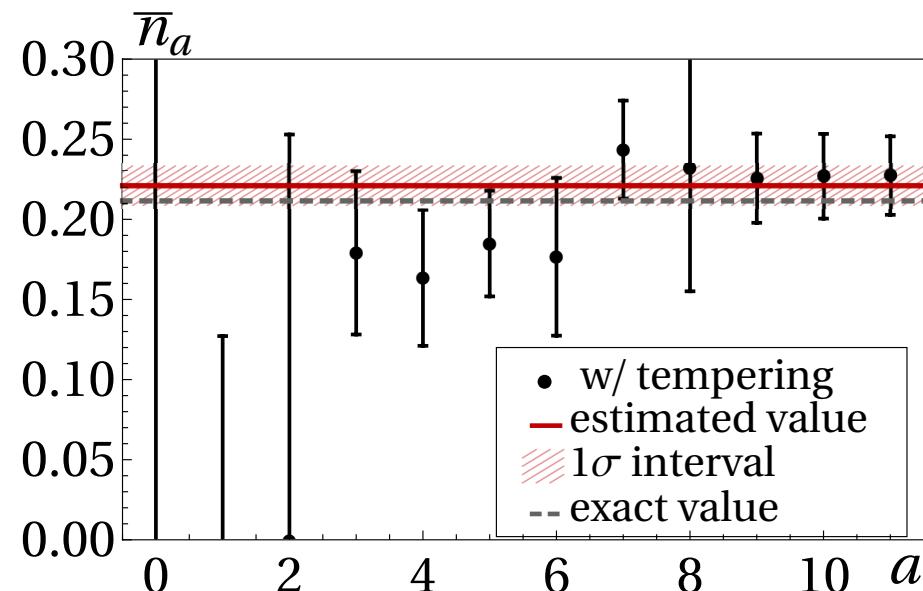
[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

① $\left| \langle e^{i\theta_{t_a}} \rangle_{S_{t_a}^{\text{eff}}} \right|$ が十分に大きくなっている
 a の範囲を特定する

② $\{\overline{O}_a\}_{a=a_{\min}, \dots, a_{\max}}$ に対して、
定数関数による χ^2 フィットを行う



$|e^{i\theta_{t_a}}|$ が小さい範囲



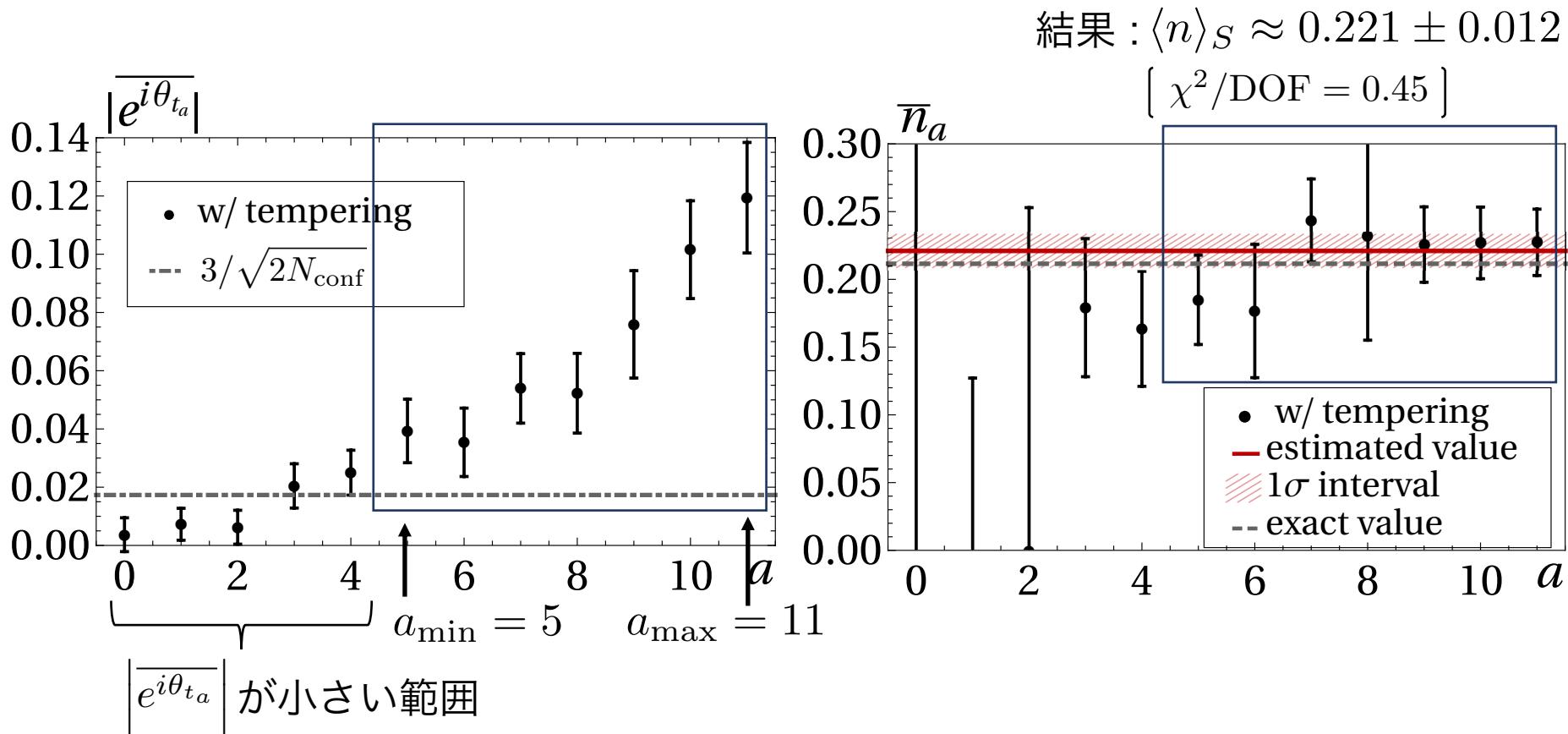
TLT法における正確な推定

$$\left[\beta\mu = 5, T = 0.5, N_{\text{conf}} = 15,000, A = 11 \right]$$

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

- ① $\left| \langle e^{i\theta_{t_a}} \rangle_{S_{t_a}^{\text{eff}}} \right|$ が十分に大きくなっている
 a の範囲を特定する

- ② $\{\overline{\mathcal{O}}_a\}_{a=a_{\min}, \dots, a_{\max}}$ に対して、
 定数関数による χ^2 フィットを行う



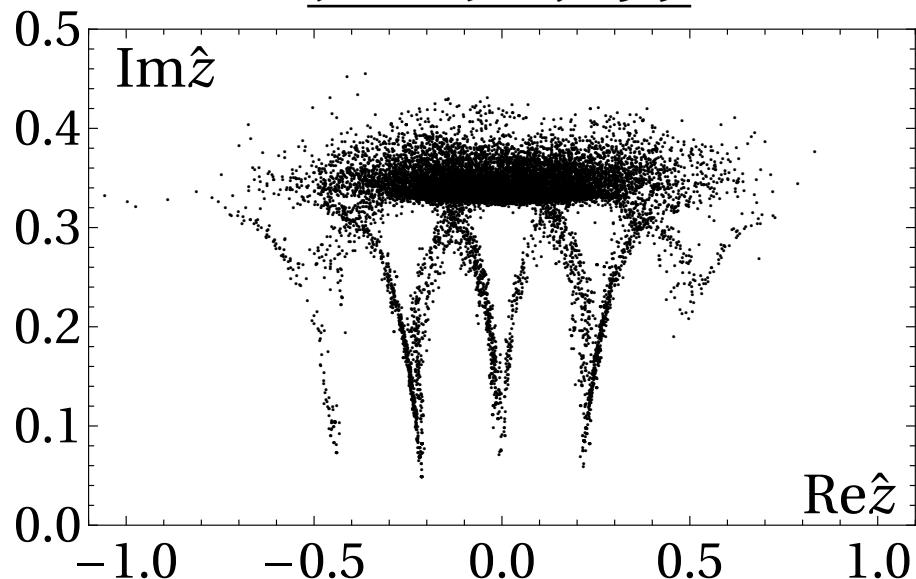
テンパリングの効果 (1/4)

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

$$[\beta\mu = 5]$$

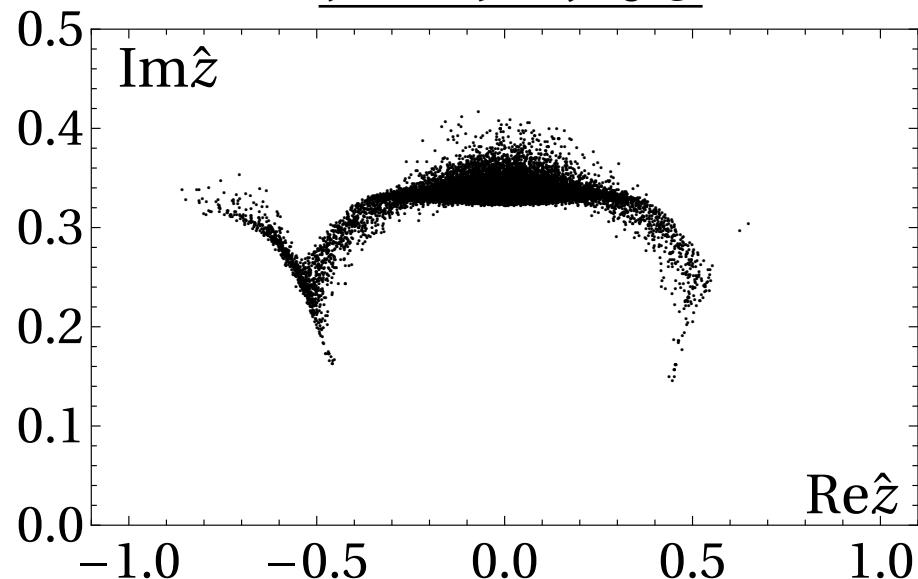
$T = 0.5$ における配位の広がり $\left[\hat{z} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_T^i \text{ の分布} \right]$

テンパリングあり



多数のthimbleからの寄与を取り入れることができている

テンパリングなし



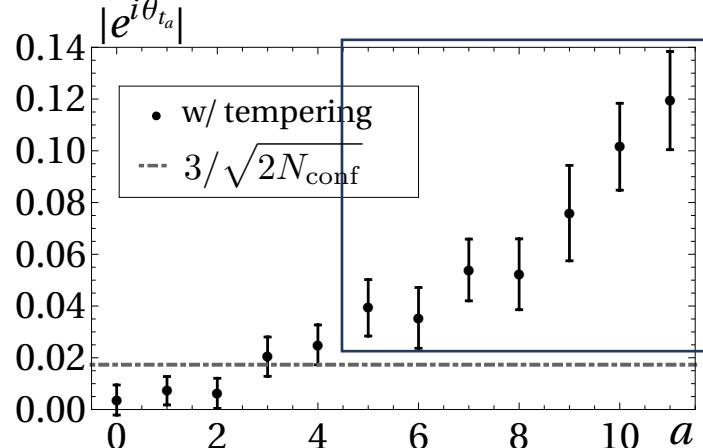
少数のthimbleにトラップされている
(multimodality が原因)

テンパリングの効果 (2/4)

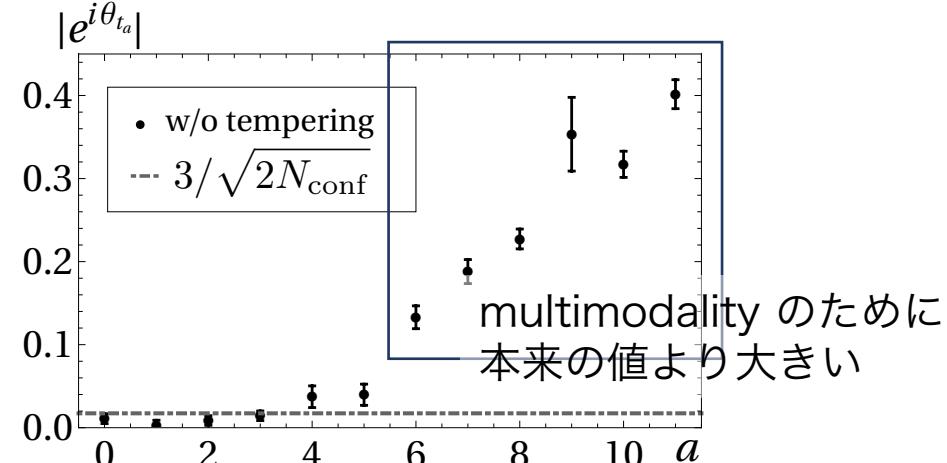
[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

- テンパリングをしない場合、期待値を正確に評価するのは非常に困難：

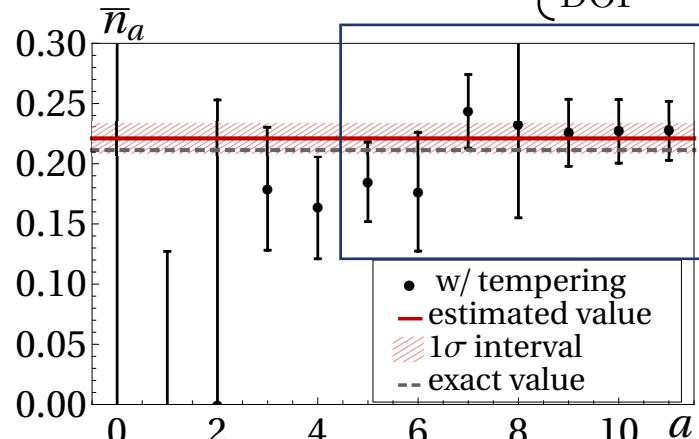
$$\left[\beta\mu = 5 \right] \quad \text{テンパリングあり}$$



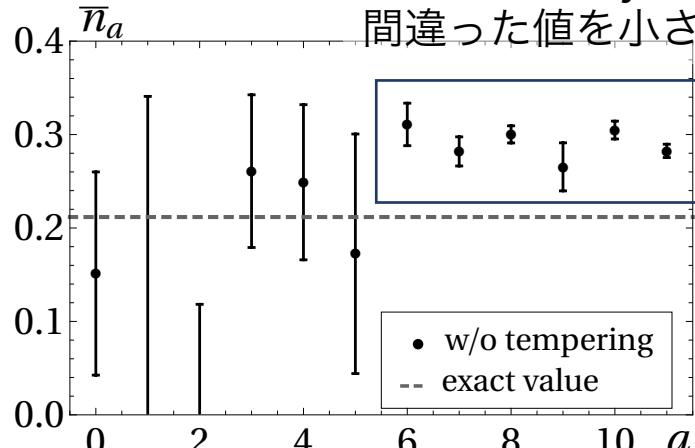
テンパリングなし



誤差の範囲で一致 $\left(\frac{\chi^2}{\text{DOF}} = 0.45 \right)$



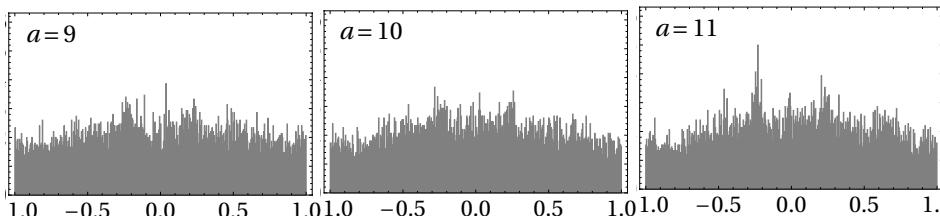
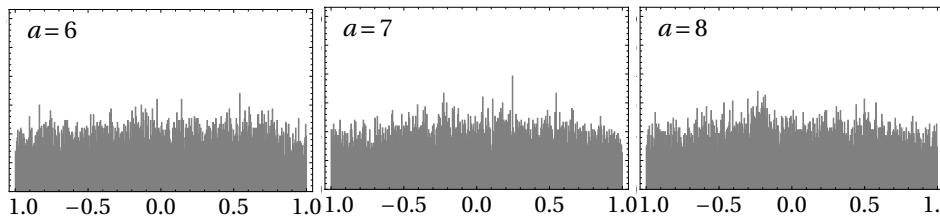
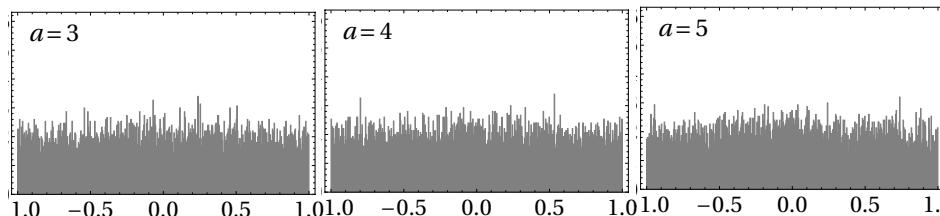
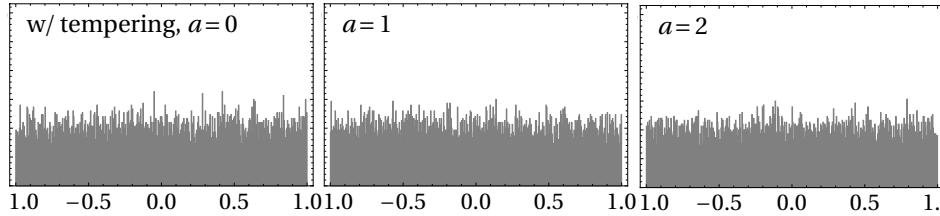
multimodalityのために
間違った値を小さい誤差で推定



テンパリングの効果 (3/4)

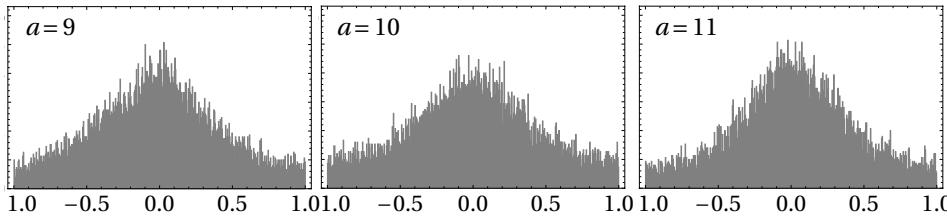
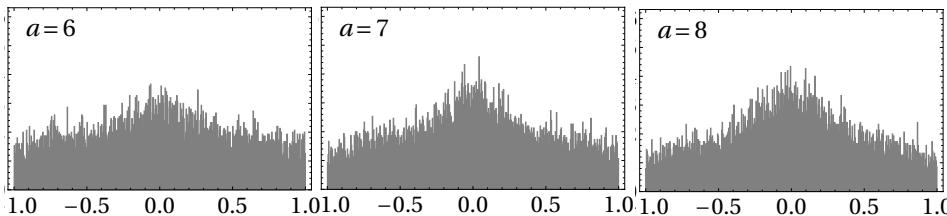
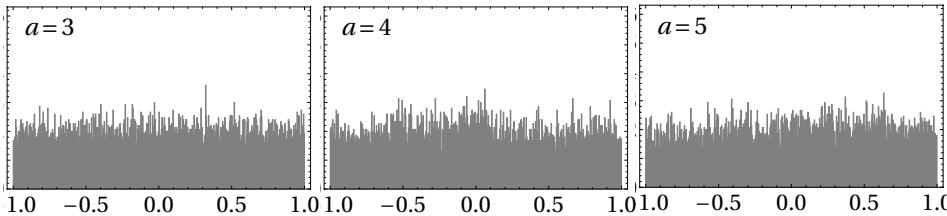
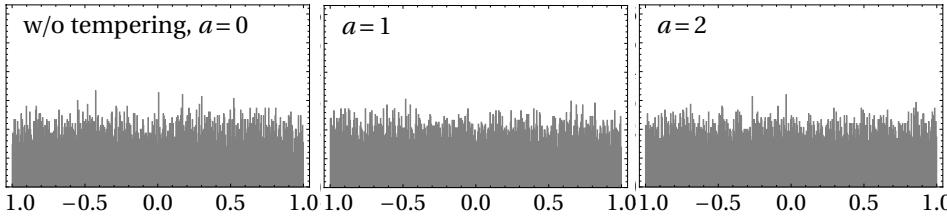
$\left[\beta\mu = 5, \theta_{t_a} \text{ の分布} \right]$

テンパリングあり



[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

テンパリングなし



多くのピークを含む

$\left[\text{ピークの数が非常に多く、それがヤコビアンの寄与で広げられている} \right]$



少数のピークしかも、ほとんどunimodal



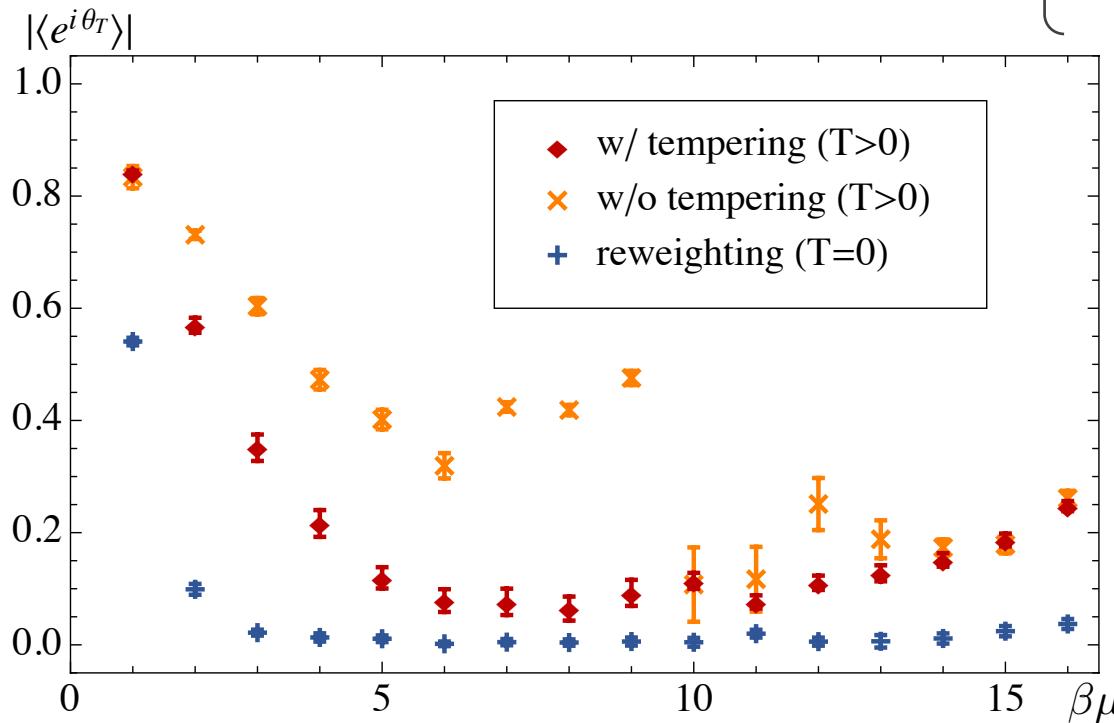
テンパリングの効果 (4/4)

[Fukuma, NM, Umeda (2019)]

- 複数のthimbleからの寄与を正しく取り入れた場合の方が

$|\langle e^{i\theta_t} \rangle_{S_t^{\text{eff}}}|$ は小さくなる傾向にある

$$\langle \mathcal{O} \rangle_S = \frac{\langle e^{i\theta_t} \mathcal{O}(z_t) \rangle_{S_t^{\text{eff}}}}{\langle e^{i\theta_t} \rangle_{S_t^{\text{eff}}}}$$



- $|\langle e^{i\theta_t} \rangle_{S_t^{\text{eff}}}|$ の値だけを見て、符号問題が解消しているかを判断するのは非常に困難
- マルコフ連鎖が大域平衡にあることと、サンプルサイズが十分であることを保証する条件が正確な計算には不可欠

5. まとめ・今後の展望

まとめ

- tempered Lefschetz thimble法 (TLT法)は
符号問題を解消する汎用性の高いアルゴリズムである [Fukuma, Umeda (2017)]
- TLT法では、期待値の評価が正しく行われていること
 - マルコフ連鎖が大域平衡に到達していること
 - サンプルサイズが十分であること
- の判断を含めて評価することが可能である [Fukuma, NM, Umeda (2019)]
- TLT法をHubbard 模型に適用し、厳密値が正しく再現されることを示した
 - 一方でテンパリングを行わない場合には、適切な flow 時間を選ぶことが非常に困難であることを議論した

今後の展望

- より大きな格子上でHubbard 模型の計算を行い、相構造を特定する
- TLT法を
 - ① 有限密度QCD
 - ② 量子モンテカルロ計算 (Hubbard模型を含む)
 - ③ 実時間 量子力学/場の量子論に適用する [Fukuma, NM, Umeda (work in progress)]
- 上記計算に向けて、さらなるアルゴリズムの改良を行う
[Fukuma, NM, Umeda (work in progress)]

Thank you.

BACK UPS

global sign mixture / residual sign

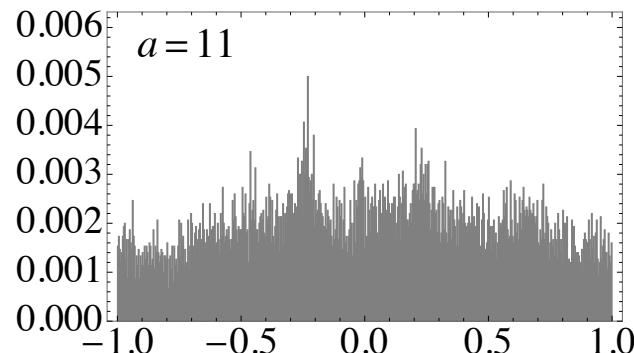
$\mu = 5$

$(\theta_T \text{の分布})$

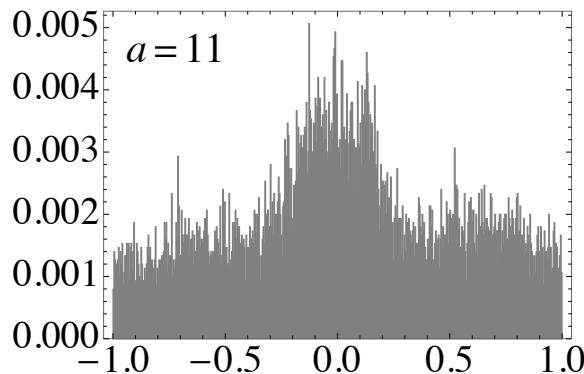
$(-\text{Im}S(z_T) \text{の分布})$

$(\arg \det J_T \text{の分布})$

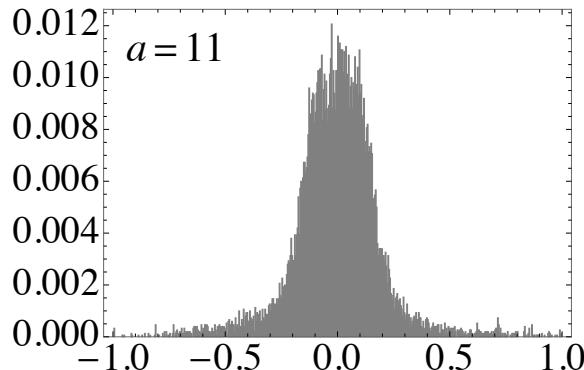
テンパリングあり



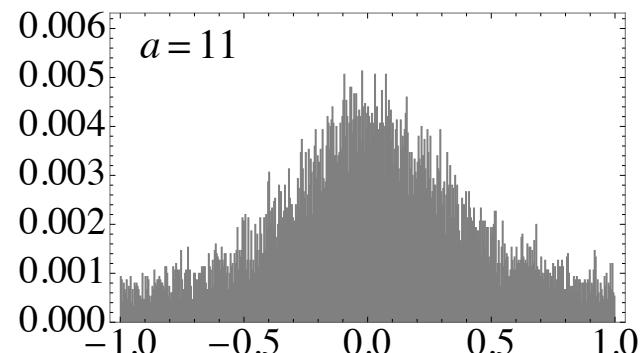
$a = 11$



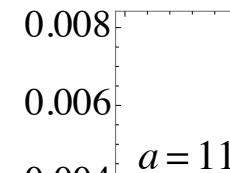
$a = 11$



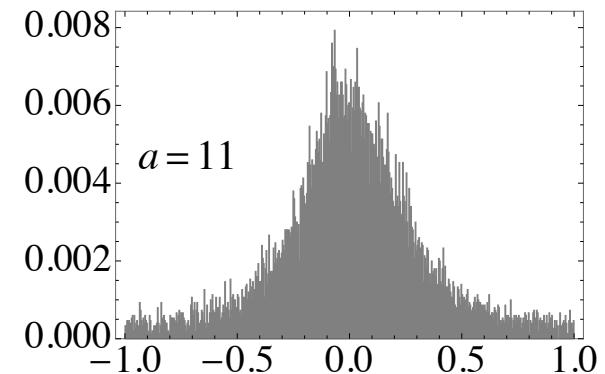
テンパリングなし



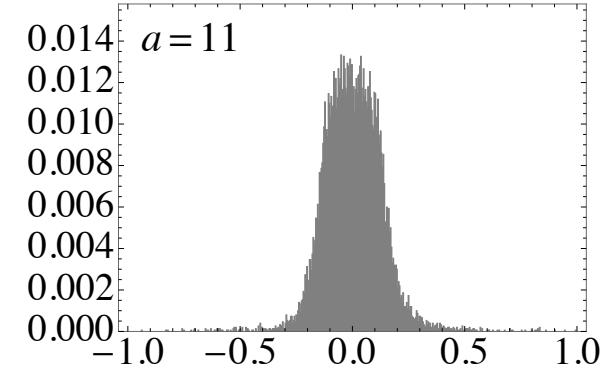
$a = 11$



$a = 11$



$a = 11$



計算の詳細

For matrices $A = (A_{xy})$, $B = (B_{xy})$, \dots , $C = (C_{xy})$,
define operators $\hat{A} \equiv \sum_{x,y} a_x^\dagger A_{xy} a_y$, $\hat{B} \equiv \sum_{x,y} a_x^\dagger B_{xy} a_y$, \dots .
Then,

$$\text{Tr}[e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} \cdots e^{\hat{C}}] = \det[\mathbb{1} + e^A e^B \cdots e^C].$$

- It is sufficient to show that:
 - (1) For a matrix D defined by $e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\cdots} \equiv e^D$, we have $e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{D}}$.
 - (2) $\text{Tr} e^{\hat{A}} = \det[\mathbb{1} + e^A]$.

proof of (1)

- Note that the linear map $A \mapsto \hat{A}$ preserves the commutation relations :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \sum_{x,y} a_x^\dagger [A, B]_{xy} a_y = \widehat{[A, B]}.$$

Therefore,

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \dots} = e^{\overbrace{(A + B + \frac{1}{2} [A, B] + \dots)}^{\widehat{[A, B]}}} = e^{\hat{D}}.$$

proof of the formula (2/2)

proof of (2) : $\text{Tr}e^{\hat{A}} = \det[\mathbb{1} + e^A]$

- Define the coherent states : $\begin{cases} |\psi\rangle \equiv e^{\sum_x a_x^\dagger \psi_x} |0\rangle \\ \langle \bar{\psi}| \equiv \langle 0| e^{\sum_x \bar{\psi}_x a_x} \end{cases}$ $\begin{cases} a_x|\psi\rangle = \psi_x|\psi\rangle \\ \langle \bar{\psi}|a_x^\dagger = \langle \bar{\psi}|\bar{\psi}_x \end{cases}$
- $\begin{cases} \psi_x, \bar{\psi}_x : \text{independent Grassmann variables} \\ |0\rangle : \text{a state s.t. } a_x|0\rangle = 0, \forall x \end{cases} \quad \begin{cases} \text{anti-commutes with themselves} \\ \text{and with } a_x, a_x^\dagger. \end{cases}$

- From the definitions, we can show that:

- $\text{Tr}\mathcal{O} = \int \prod_x (d\bar{\psi}_x d\psi_x) e^{-\sum_x \bar{\psi}_x \psi_x} \langle \mp \bar{\psi} | \mathcal{O} | \psi \rangle$ $\begin{cases} \mp \text{ depends on whether} \\ \mathcal{O} \text{ has even/odd number of} \\ \text{fermion operators.} \end{cases}$
- $\langle \bar{\psi} | \psi \rangle = e^{\sum_x \bar{\psi}_x \psi_x}$
- $e^{\hat{A}} | \psi \rangle = | e^A \psi \rangle \quad \left[(e^A \psi)_x \equiv \sum_y (e^A)_{xy} \psi_y \right]$

Thus,

$$\begin{aligned} \text{Tr}e^{\hat{A}} &= \int \prod_x (d\bar{\psi}_x d\psi_x) e^{-\sum_x \bar{\psi}_x \psi_x} \frac{\langle -\bar{\psi} | e^{\hat{A}} | \psi \rangle}{\left[= \langle -\bar{\psi} | e^A \psi \rangle = e^{-\sum_{x,y} \bar{\psi}_x (e^A)_{xy} \psi_y} \right]} \\ &= \int \prod_x (d\bar{\psi}_x d\psi_x) e^{-\sum_{x,y} \bar{\psi}_x (\mathbb{1} + e^A)_{xy} \psi_y} = \det[\mathbb{1} + e^A]. \end{aligned}$$